

**Ústav fyzikální chemie
J. Heyrovského AV ČR, v. v. i.**

IČ: 61388955

Sídlo: Dolejškova 2155/3, 182 23 Praha 8

**Výroční zpráva o činnosti a hospodaření
za rok 2007**

Dozorčí radou instituce projednána dne: 3.6.2008

Radou instituce schválena dne: 12.6.2008

V Praze dne 16.5.2008

I. Informace o složení orgánů veřejné výzkumné instituce a o jejich činnosti či o jejich změnách

a) Výchozí složení orgánů pracoviště

Pověřen vedením od 1. 1. 2007: **Prof. RNDr. Petr Čársky, DrSc.**

Ředitel instituce: **Prof. RNDr. Zdeněk Samec, DrSc.**

jmenován s účinností od : **1.5.2007**

Rada instituce zvolena dne 26.2.2007 ve složení:

předseda: **doc. Dr. rer.nat. Martin Hof, DSc.**

místopředseda: **Ing. Zdeněk Sobalík, CSc.**

členové:

interní (ÚFCH JH):

Doc. RNDr. Svatopluk Civiš, CSc.

Prof. RNDr. Ladislav Kavan, DSc.

RNDr. Milan Kočířík, CSc.

Prof. RNDr. Zdeněk Samec, DrSc.

externí:

Prof. Dr. Ing. Karel Bouzek, Fakulta chemické technologie Vysoké školy chemicko-technologické v Praze

Prof. Ing. Ivan Stibor, CSc., Fakulta chemické technologie Vysoké školy chemicko-technologické v Praze

Doc. RNDr. Eva Tesařová, CSc., Přírodovědecká fakulta University Karlovy v Praze.

Dozorčí rada jmenována dne 1.5.2007 ve složení:

předseda: *Ing. Karel Aim, CSc., člen Vědecké rady Akademie věd České republiky*

místopředseda: *Ing. Blanka Wichterlová, DrSc., ÚFCH JH AV ČR, v. v. i.*

členové:

Doc. Ing. Jiří Hostomský, CSc., Ústav anorganické chemie, AV ČR, v.v.i.

Ing. Milan Petrák, Výzkumný ústav anorganické chemie, a. s., Ústí nad Labem

Ing. Václav Rejholec, CSc., Zentiva, a.s.

b) Změny ve složení orgánů:

V roce 2007 nenastaly změny ve složení orgánů instituce.

c) Informace o činnosti orgánů:

Ředitel:

Hlavní aktivity ředitele v řízení instituce:

a) předložení návrhů organizačního řádu, vnitřního mzdového předpisu, pravidel pro hospodaření s fondy, a spisového a skartačního řádu Radě instituce ke schválení,

b) jmenování členů kolegia ředitele- tento orgán tvoří zástupce ředitele pro vědu a výchovu, zástupce ředitele pro ekonomiku a technickou správu a zástupce Rady instituce,

c) organizace jednání kolegia ředitele, které se v roce 2007 konalo celkem 9x, závěry jednání jsou zveřejněny na interních webovských stránkách ústavu,

d) předložení návrhu rozpočtu Radě instituce ke schválení,

e) příprava a uzavření Kolektivní smlouvy s Odborovou organizací,

f) předložení návrhů vyžadujících souhlas Dozorčí rady této radě ke schválení,

g) rozhodnutí (v roce 2008 celkem 9) o osobním hodnocení studentů, jmenování předsedů a členů komisí atestační, konkurzní, investiční, škodní a likvidační, inventarizační, pro výpočetní techniku, a dále rozhodnutí vyplývající z doporučení kolegia ředitele ,

h) příprava základních dokumentů pro návrh projektů financovaných ze strukturálních fondů EU,

i) příprava plánů personálního rozvoje vědeckých oddělení na základě návrhů vedoucích oddělení,

j) přijetí nových pracovníků na základě konkurzních řízení a rozhodnutí o prodloužení resp. novém zařazení pracovníků ústavu na základě jejich atestace.

Rada instituce:

Jednání Rady instituce v roce 2007 se konalo celkem 14krát, 1krát proběhlo hlasování per rollam.

Rada instituce navrhla předsedovi AV ČR jako kandidáta na funkci ředitele Prof. RNDr. Zdeňka Samce, DrSc. (5. zasedání RI dne 29. 03. 07)

Rada instituce nepotvrdila, že se Ústav stane zakládajícím členem sdružení IAV (6. zasedání RI dne 10. 04. 2007, 9. zasedání RI dne 15.6.2007). Rada instituce schválila dosavadní postup ředitele při řešení otázky přistoupení k IAV (11. zasedání RI dne 20.9.2007).

Rada instituce doporučila přijmout následující pravidla pro uzavírání pracovních smluv: Při dovršení věku 65 let bude úvazek stanoven na 50% celkové roční kapacity a po dovršení věku 70 let na 5% celkové kapacity (7. zasedání RI dne 04.05.2007).

Rada instituce se usnesla, že návrhy grantových projektů budou nadále posuzovány také RI. (4. zasedání RI dne 19. 03. 07)

Rada instituce považuje účast ústavu v připravované soutěže o strukturální fondy EU za účelnou, a doporučila prověřit technické a programové možnosti takového projektu. (3. zasedání RI dne 01. 03. 07)

Rada instituce podpořila návrh Oddělení struktury a dynamiky v katalýze na účast ústavu v „European Research Institute of Catalysis“ vznikajícího ze sítě excellence IDECAT (7. zasedání RI dne 04.05.2007).

Rada instituce schválila možnost jednorázového udělení mimořádné pozice pro významného vědeckého pracovníka staršího 70ti let vždy po dobu jednoho roku. (11. zasedání RI dne 20.9.2007). Současně schválila návrh nabídnout udělení této pozice pro rok 2008 Prof. Ing. R. Zahradníkovi, DrSc. (13. zasedání RI dne 8.11.2007)

Rada instituce upozornila na povinnost pracovníků ústavu uvedenou v bodě 11) zápisu z 5. schůze kolegia ředitele ze dne 14.8. 2007a její platnost pro pracovníky s úvazkem 50% ve věku přes 65 let. (Podle § 304, odst. 1, Zákoníku práce, mohou zaměstnanci vedle svého zaměstnání v pracovněprávním vztahu vykonávat výdělečnou činnost, která je shodná s předmětem činnosti zaměstnavatele, u něhož jsou zaměstnání, jen s jeho předchozím písemným souhlasem.) (14. zasedání RI dne 23.11.2007)

Dozorčí rada:

V roce 2007 proběhla dvě zasedání Dozorčí rady Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., (DR) ve dnech 29. května a 3. prosince 2007:

1. zasedání DR dne 29. 5. 2007

Hlavní body jednání a nejdůležitější body usnesení DR:

Informace o úloze DR v systému orgánů pracoviště.

Projednání a schválení Jednacího řádu DR s úpravami.

Informace ředitele o struktuře, organizaci, vědeckých záměrech, rozpočtu na rok 2007 a dalších údajích týkajících se hospodaření pracoviště v roce 2007.

Návrhy stavebních akcí připravovaných na rok 2007.

Seznámení Dozorčí rady s vnitřními předpisy pracoviště.

Informace o platných smlouvách týkajících se nakládání s majetkem.

Příprava návrhů právních úkonů, vymezených zákonem č. 341/2005 Sb. v par. 19, odst. 1, písmeno b).

DR byla informována o přípravných krocích v rámci projektu 6. RP EU sítě excellence IDECAT, směřujících k ustavení právního subjektu European

Research Institute on Catalysis (ERIC). DR souhlasí s dalším jednáním v této věci.

2. zasedání DR dne 3. 12. 2007

Hlavní body jednání a usnesení DR:

3. Čerpání rozpočtu ke dni 31. 10. 2007 a odhad čerpání rozpočtu do konce roku 2007.

DR bere na vědomí informaci o čerpání rozpočtu ke dni 31.10.2007 a další přednesené informace.

DR bere na vědomí návrh nové struktury vnitřních předpisů ÚFCH JH a doporučuje zavést i Směrnici pro nakládání s účelovými prostředky.

6. Návrh na zakoupení Ramanova spektrometru

DR projednala návrh na zakoupení Ramanova spektrometru v celkové ceně 11 mil. Kč z prostředků AV ČR (8,5 mil. Kč) a ÚFCH JH (2,5 mil. Kč) a vyslovila souhlas s žádostí ústavu o přidělení investičních prostředků na Ramanův spektrometr v rámci konkursu AV ČR.

8. Výpověď smluv s firmou SODEXHO a návrh na rekonstrukci budovy jídelny

DR schvaluje výpověď smlouvy o nájmu nebytových prostor ve stravovacím zařízení Akademie věd ČR v Praze, U Slovanky 3, Praha 8, s firmou SODEXHO a souhlasí se záměrem rekonstrukce budovy a výběrovým řízením na dodavatele stravování.

II. Informace o změnách zřizovací listiny:

V roce 2007 nebyly provedeny žádné změny ve znění zřizovací listiny.

III. Hodnocení hlavní činnosti:

V souladu s platnou zřizovací listinou ústav uskutečňuje vědecký výzkum v oblasti fyzikální chemie, elektrochemie, analytické chemie a chemické fyziky a vyhledává možnosti využití jeho výsledků.

Předmětem hlavní činnosti je teoretický a experimentální výzkum v uvedených oblastech včetně vývoje počítačových programů pro kvantově chemické a další teoretické výpočty. Vedle toho ústav přispívá ke zvyšování úrovně poznání a vzdělanosti a využití výsledků vědeckého výzkumu v praxi. Získává, zpracovává a rozšiřuje vědecké informace, poskytuje vědecké posudky, stanoviska a doporučení a provádí konzultační a poradenskou činnost. Ve spolupráci s vysokými školami uskutečňuje doktorské studium, vychovává vědecké pracovníky, zajišťuje přednáškové kurzy, cvičení a praktika pro studenty a pořádá specializované letní školy. V rámci předmětu své činnosti rozvíjí mezinárodní spolupráci, včetně organizování společného výzkumu se zahraničními partnery, přijímání a vysílání stážistů, výměny vědeckých poznatků a přípravy společných publikací, pořádá vědecká setkání, konference a semináře, včetně mezinárodních. Svou činnost vyvíjí samostatně i ve spolupráci s vysokými školami a dalšími vědeckými a odbornými

institucemi veřejného i soukromého sektoru.

Ústav v roce 2007 pokračoval v teoretickém i experimentálním výzkumu ve vybraných oblastech chemické fyziky, elektrochemie, katalýzy a přílehlých oborů. V rámci řešení výzkumného záměru a grantových projektů byly dosaženy tyto nejvýznamnější výsledky:

Vývoj obecné metody přesného výpočtu stopových koncentrací látek ve vzduchu na základě výsledků experimentálního a teoretického výzkumu kinetiky vzniku a zániku iontů v proudové trubici s vybranými ionty (SIFT-MS). Tato metoda umožňuje přesné stanovení látek vyskytujících se v poměru jedné molekuly na miliardu molekul vzduchu, a to bez ohledu na vlhkost, a výrazné zmenšení rozměrů a hmotnosti měřicího přístroje. Jeden z prvních takových přístrojů na světě byl uveden do provozu ve skupině hmotnostní spektrometrie v roce 2006. Detailní rozbor procesů v plazmatu iontového zdroje, který je součástí tohoto přístroje, umožnil další zvýšení citlivosti a optimalizaci detekčního limitu metody SIFT-MS. Autoři dále získali původní a nová data pro rozdělení koncentrací metabolitů přítomných v dechu mladých dobrovolníků (17-19 let) v rozsahu do jedné objemové milióntiny (ppm). Koncentrace amoniaku, acetonu a kyanovodíku popsali v závislosti na věku dobrovolníků od 4 do 83 let. V závěru roku 2007 zahájili výzkum použití metody SIFT-MS pro diagnostiku astmatu ve spolupráci s nemocnicí Na Homolce a klasifikace bakteriálních kultur ve spolupráci se Státním zdravotním ústavem (P. Španěl se skupinou hmotnostní spektrometrie). Tento výsledek byl ústavy chemické sekce vybrán jako nejlepší anotovaný výsledek chemické sekce II. vědní oblasti v hodnocení činnosti AV ČR 2007.

Systematický výzkum uhlíkových nanostruktur metodami optické a Ramanovy spektroelektrochemie umožnil zkorigovat některé předchozí omyly v literatuře, z nichž nejzávažnější byl nesprávný postup stanovení vazebné energie excitonu v uhlíkových nanotubách. Výzkum uhlíkových lusků s fullereny C₆₀, C₇₀, endohedrálním fullerenem: Dy₃N@C₈₀ a izotopově značeným fullerenem ¹³C₆₀ prokázal význam elektrochemického dopování pro přesné vyhodnocení vibračních a optických spekter. Jedním z praktických výstupů se stala nová metoda odlišení jedno- a dvojtěnných uhlíkových nanotub a chemického dopování dvojtěnných nanotub. Byl vyvinut nanokomposit, materiál s obsahem 0.04 váh. % elementárního uhlíku, což je o 2 řády méně, než u současných elektrodových materiálů, kde se jako vodivá komponenta používá grafit. Tato nová strategie, zvaná „nanotube wiring“ má tedy zřejmou aplikaci pro zvýšení hustoty náboje a energie v bateriích Li-ion (oddělení elektrochemických materiálů pod vedením L. Kavana).

Vývoj a příprava hierarchických katalyzátorů, materiálů spojujících přednosti zeolitů s mezoporezními molekulovými sítěmi, které obsahují jak mikropory, tak mesopory. Dvěma syntetickými postupy přípravy hierarchických katalyzátorů se podařilo spojit výhody klasických zeolitových katalyzátorů (vysoká síla kyselosti, chemická a teplotní odolnost) s přednostmi mezoporezních molekulových sítí (rychlejší transport reaktantů a produktů). Nové hierarchické materiály slibují značnou perspektivu v katalytických aplikacích (J. Čejka, A. Zukal, N. Žilková, Z. Pavlačková).

Vývoj metody kombinující ²⁷Al NMR spektroskopii vysokého rozlišení s QM/MM

výpočty pro zjištění distribuce hliníku, která významně ovlivňuje katalytickou aktivitu zeolitů s vysokým obsahem křemíku. Přístup umožnil první částečnou charakterizaci Al distribuce v průmyslu používaného zeolitu ZSM-5 (Š. Sklenák, J. Dědeček, B. Wichterlová).

Molekulární interpretace relaxace rozpouštědla v přítomnosti různých chromoforů definovaně umístěných v různých z-pozicích ve fosfolipidových dvojvrstvách. Experimentální přístup umožnil strukturní charakterizaci lipidových systémů používaných jako "drug delivery vectors" (M. Hof se skupinou biospektroskopie).

Objev fotodisociace molekul halogenovodíků na volných nanočásticích ledu, které hrají klíčovou úlohu v chemii atmosféry při tvorbě ozonové díry. O významu tohoto výsledku svědčí i to, že článek byl vybrán k publikaci ve *Virtual Journal of Nanoscale Science and Technology* (M. Fárník, V. Poterya).

První důkaz redukce kyslíku na polarizovaném rozhraní voda|1,2-dichlorethan (1,2-DCE) katalyzované komplexem 5,10,15,20-tetrafenyl-21H, 23H-porfínu kobaltu (II) (CoTPP). CoTPP jednak usnadňuje postupný přenos dvou protonů z vodné do organické fáze, jednak v adsorbovaném stavu váže molekulární kyslík a působí jako mediátor přenosu elektronu (V. Mareček, Z. Samec, A. Trojánek, H. Janchenová).

Příprava vysoce kvalitních mezoporézních vrstev TiO₂ na vodivém skle postupem využívajícím princip supramolekulárního templátování. Solární článek, v němž byla použita uvedená vrstva senzibilizovaná barvivem N945, vykazoval účinnost přeměny solární energie na elektrickou 4,63% (L. Kavan, M. Zukalová, J. Procházka).

Příprava bifunkčních katalyzátorů na bázi mezoporézních molekulových sít, které vykazovaly vysokou aktivitu v Heckově reakci i bez přidání báze do reakční směsi (J. Čejka, J. Demel).

Objasnění mechanismu disociativní rekombinace LiH⁺ iontů, které hrají důležitou roli v chemii raného vesmíru. Získané teoretické výsledky poprvé správně interpretují experimentální data (R. Čurík).

Za svou výzkumnou činnost bylo několik mladých vědeckých pracovníků v průběhu roku 2007 oceněno různými tuzemskými a zahraničními oceněními, např:

Mgr. Magdalena Hromadová, Ph. D - Klaus-Jürgen Vetter Prize for Electrochemical Kinetics 2007 (Ocenění Mezinárodní elektrochemické společnosti ISE);

RNDr. Ing. Martin Kalbáč, Ph.D. – Prémie Otto Wichterleho;

Mgr. Aleš Benda, Ph. D. – Česká hlava, kategorie Doctorandus;

Mgr. Aleš Benda, Ph. D. - Cena ministra školství, mládeže a tělovýchovy pro vynikající studenty a absolventy studia ve studijním programu;

Mgr. Roman Čurík, Ph. D. - Cena Josefa Hlávky;

Ing. Pavel Topka - Rhodia – Cena za chemii, 2. místo;

Ing. Lucie Kolesníková - Cena Spektroskopické společnosti J.M. Marci, 1. místo v kategorii diplomových prací;

Výsledky výzkumných prací ústavu byly popularizovány prostřednictvím médií (tisk, rozhlas, televize), např.:

Český rozhlas Leonardo, 1.1.2007 - Novoroční rozhovor s profesorem Rudolfem Zahradníkem v pořadu "Vstupte" redaktora Roberta Tamchyny;

Český rozhlas Leonardo, 18.1.2007 – „Když olefiny tančí" - pořad věnovaný metatizezi olefinů. O těchto tématech, ale i o katalýze jako takové, si s Dr. Hynkem Balcarem a prof. Jiřím Čejkou v pořadu Natura povídala Hana Staňková;

Český rozhlas Leonardo, 2.4.2008 - Pořad Třetí dimenze byl věnován počítačovým simulacím ve fyzice a chemii. Na otázky Luboše Veverky mezi pozvanými odborníky odpovídal i prof. Petr Čársky z Oddělení teoretické chemie;

Český rozhlas Leonardo, 28.3.2007 -Pořad Natura - Rozhovor s profesorem Antonínem Vlčkem a profesorem Harry B. Grayem na téma "Přenos elektronů", kterému prof. Gray věnoval prestižní Brdičkovu přednášku, kterou v ústavu přednesl v červnu jako její 17.řečník;

Český rozhlas Leonardo, 13.9.2007 -Rozhovor s Dr. Janem Hrušákem, členem Akademické rady AV ČR a vědeckým pracovníkem oddělení chemické fyziky ÚFCH JH o české vědě, jejím postavení v Evropě a ve světě;

Český rozhlas 3 – Vltava, 11.10.2007 -Pořad Mozaika – rozhovor Jany Olivové s docentem Zlatko Knorem o právě udělené Nobelově ceně za chemii, kterou obdržel profesor Gerhard Ertl, se kterým pojí docenta Knora nejen společné vědecké téma - reakce na površích, ale i například vážná hudba, kterou oba aktivně celý život provozují;

Mladá Fronta DNES, 13.10.2007 - Dr. Jan Plšek o některých výsledcích výzkumu profesora Ertla, nositele Nobelovy ceny za chemii 2007, v článku Františka Houdka v Mladé Frontě Dnes;

Česká televize, 24.11.2007 - pořad Slavní slavným: 8 vědců získalo ocenění Česká hlava 2007. Doktor Aleš Benda, mladý vědec pracující ve skupině biospektroskopie oddělení biofyzikální chemie, byl mezi oceněnými. Získal cenu Doctorandus sponzorovanou společností Siemens;

Akademický Bulletin No. 12/2007- Článek profesora Rudolfa Zahradníka s názvem NĚKOLIK POZNÁMEK O ŠKOLSTVÍ A VĚDĚ (Svět a provincie) je zamyšlením a komentářem k systému školství a vědy u nás ale i ve světě;

Akademický Bulletin No. 12/2007 - "Školství na rozcestí" - Profesor Rudolf Zahradník v rozhovoru o systému školství, studentech, vědě;

Akademický Bulletin No.1/2008 - Článek K. Stejskalové s fotografiemi P. Králíka "Nejen prací živ je člověk". Pracovníci z Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v. v. i., již potřetí uspořádali na sklonku roku 2007 týdenní komorní výstavu svých převážně výtvarných amatérských prací;

Akademický Bulletin No.1/2008 - Doktor Aleš Benda, mladý vědec pracující ve skupině biospektroskopie oddělení biofyzikální chemie byl mezi oceněnými. Získal cenu Česká hlava 2007 - Doctorandus sponzorovanou společností Siemens, s.r.o. ;

Vědecká a pedagogická spolupráce pracoviště s vysokými školami

Ústav se v roce 2007 podílel na školení 43 doktorandů (v presenční, kombinované a distanční formě studia; z tohoto počtu v průběhu roku 2007 obhájilo 7 studentů); 10 diplomantů a 18 pregraduátů.

Na výuce studentů na 9 vysokých školách se průběhu letního/zimního semestru podílelo 23/20 vědeckých a odborných pracovníků ústavu, celkem bylo odpřednášeno 355/425 hodin v 18/22 semestrálních cyklech přednášek, seminářů a cvičení.

13 vědeckých pracovníků bylo v roce 2007 členy oborových rad doktorského studia a 15 vědců bylo členy komisí pro státní bakalářské, závěrečné a rigorózní zkoušky v oboru fyzikální chemie a obhajoby disertačních prací na několika univerzitách a vysokých školách (PřF UK, VŠCHT, Universita Pardubice, Masarykova Univerzita v Brně, Palackého Univerzita v Olomouci, Jihočeská Univerzita v Českých Budějovicích).

Pracovníci ústavu v roce 2007 spolupracovali na řešení 35 projektů s vysokými školami a byly dosaženy následující významné výsledky:

Vytvoření vysoce přesných analytických povrchů potenciální energie tří nejnižších elektronových stavů systému He_3^+ . Výsledek umožňuje modelování povrchů potenciální energie iontových klastrů helia pro strukturální, spektroskopické a dynamické studie (spolupráce s Univerzitou Ostrava).

Příprava klastrů pyrolu, které představují model pro studium fotochemických a radiačních procesů v biologických systémech (spolupráce s VŠCHT).

Nové práškové materiály obsahující porfyriny ve vrstevnatých materiálech generují při ozařování singletní kyslík a mohou být použity k fotodesinfekci. Dehydratací ztrácejí tyto materiály schopnost produkovat singletní kyslík, opětná rehydratace vede k obnovení původních vlastností (spolupráce s VŠCHT a PřF UK a Univerzitat Autònoma de Barcelona, Španělsko).

Vývoj a charakterizace pevných amalgamových kompozitních elektrod, připravených z jemného prášku stříbrného amalgámu a epoxidové pryskyřice. Navržené elektrody

představují kombinaci mezi kovovými kompozitními elektrodami a amalgámovými pevnými elektrodami. Neobsahují žádnou kapalnou rtuť a mohou být použity ve voltametrických a coulometrických měřeních či jako detektor v chromatografii nebo průtokové analýze (spolupráce s PŘF UK).

Vývoj metodiky pro speciaci kadmia, olova a mědi v půdních roztocích voltametrickými metodami a technikou difusního gradientu na tenké vrstvě a jejich použití v analýze půdních roztoků ze dvou typů půd se třemi typy pěstovaných rostlin (spolupráce s ČZU v Praze).

Kombinací techniky přípravy nábrusů porézního materiálu a následné analýzy obrazů pořízených skenovací elektronovou mikroskopií pomocí zpětně odražených elektronů byla vypracována metoda vyhodnocení vybraných deskriptorů makroporézní struktury nosičů kompozitních membrán typu zeolit-keramika. Metoda se ukázala vhodná pro stochastickou rekonstrukci pórovité struktury těchto materiálů (spolupráce s VŠCHT).

Filmy TiO₂ modifikované polydimethylsiloxanem (PDMS) nebo SiO₂, připravené metodou sol-gel kombinovanou s technikou dip-coating mají velmi dobré mechanické vlastnosti. Jejich fotokatalytické a adsorpční vlastnosti zásadně závisejí na složení a podmínkách přípravy filmu, což umožňuje dosáhnout povrchových úprav s optimální účinností pro aplikace v ochraně životního prostředí (např. samočisticí povrchy) (spolupráce s VŠCHT).

Důkaz elektrokatalytické konverze plynného dusíku na amoniak za normálního tlaku a mírně zvýšené teploty. Reakce je příkladem první elektrokatalytické fixace dusíku bez katalýzy komplexy přechodových kovů. Komplex fullerenu a gama-cyklodextrinu, který je rozpustný ve vodě, je mediátorem přenosu elektronu (spolupráce s PŘF UK).

Objasnění mechanismu hydrodeoxygenace různých aldehydů na katalyzátorech na bázi palladia nanoseného na nosiči. Rychlost hydrogenační reakce roste s klesající polaritou použitého rozpouštědla. V případě benzaldehydu byla prokázána přímá hydrogenolýza C=O vazby (spolupráce s VŠCHT).

Příprava nové iontové kapaliny složené z tridodecylmethylamonného kationtu a tetrakis(pentafluorophenyl) borátového aniontu, a její použití ve výzkumu přenosu iontů přes vodivou polarizovatelnou membránu. Vyhodnocení Gibbsových energií přenosu a korelace s klasickými systémy nemísitelných kapalin (spolupráce se 3. LF UK).

Objasnění metabolických pochodů spojených s působením vitamínu B₁₂ a folátů na tvorbu sirných látek (především kyseliny thiodiglykolové) a jejich exkreci do moče (spolupráce s 1. LF UK a FTVS UK).

Nový typ mono- a bis-imidazolinonových chelátujících ligandů má využití ve farmacii a vzhledem ke svému asymetrickému centru jde o slibné specifické chirální katalyzátory. Elektrochemické studium těchto látek umožnilo formulovat redukční mechanismus při různých pH, který byl prokázán izolací diastereoizomerních intermediátů a konečného produktu (spolupráce s Universitou Pardubicích).

V roce 2007 v ústavu ve své činnosti pokračovalo pět center základního (4) a aplikovaného (1) výzkumu podporovaných poskytovatelem MŠMT:

Pokračovaly práce na vývoji nové „single molecule“ metody - časově rozlišené fluorescenční korelační spektroskopii (FLCS). S pomocí této metody skupina biospektroskopie objasnila na molekulární úrovni mechanismus sbalení středně velké molekuly DNA indukovaného sperminem. Skupina bioelektrochemie, která se na řešení projektu rovněž podílí, objasnila mechanismus tvorby iontových párů fosfolipidů adsorbovaných na polarizovatelném rozhraní voda/organická fáze s ionty ve vodné fázi (M. Hof, Centrum Fluorescenční mikroskopie v biologickém a lékařském výzkumu, koordinátor ÚFCH JH).

Příprava a spektroelektrochemické chování různých uhlíkatých nanostruktur, zejména jedno- a dvojtěnných uhlíkových nanotub a fullerenových lusků. Kromě čistě uhlíkatých materiálů byly připraveny supramolekulární soustavy s polymery, organickými a organometalickými molekulami. Uhlíkové nanostruktury byly rovněž kombinovány s oxidem titaničitým a materiály typu olivinů LiFePO_4 a LiMnPO_4 (L. Kavan, Centrum nanotechnologií a materiálů pro nanoelektroniku, koordinátor FZÚ).

Nově vyvinuté fotokatalyzátory na bázi oxidu titaničitého byly aplikačně využity ve spolupráci s průmyslovými partnery, např. US SPA Dolní Dobrouč (vývoj zařízení pro desinfekci a fotokatalytické čištění vody masážních bazénů), FAGOR (vývoj samočisticí povrchové úpravy pečících trub), PRECHEZA Přerov (vývoj fotokatalyzátoru na bázi nanokrystalického anatasu jako fotoaktivní příměsi samočisticích nátěrových hmot) (J. Jirkovský, Výzkumné centrum pro nanopovrchové inženýrství - NANOPIN - koordinátor ATG, s.r.o.).

Reakcí lithné soli příslušného cyklopentadienyly s ZrCl_4 byl syntetizován zirkonocen dichloridový komplex s tetramethyl(fenyl)cyklopentadienylovým kruhem [$\text{ZrCl}_2(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_4\text{Ph})_2$] a jeho nízkovalemtní zirkonocenový komplex s koordinovanou molekulou bis(trimethylsilyl)acetyleny. Redukce této vysoce substituované sloučeniny však neprobíhá kvantitativně a poskytuje vedlejší produkt - komplex s koordinovanou molekulou butadienu vznikající rozkladem tetrahydrofuranu. K charakterizaci všech tří připravených sloučenin byly použity spektroskopické metody a rentgenkrystalografická analýza (M. Horáček, Centrum struktury a syntetické aplikace komplexů přechodných kovů, koordinátor VŠCHT).

Provedené spektroskopické studie malých reaktivních molekul s využitím submilimetrové spektroskopie rozšířily spektroskopickou identifikaci radikálu FCO_2 (Z. Zelinger, Centrum pro kvazioptické systémy a terahertzovou spektroskopii, koordinátor VŠCHT).

Další pedagogickou činností, které se ústav od roku 2005 věnuje intenzivněji, je vzdělávání středoškolské mládeže a práce s talentovanými SŠ studenty, kteří se zajímají o studium přírodních věd:

Stáže talentovaných studentů v laboratořích - v roce 2007 ústav pokračoval v

akademickém projektu Otevřená věda (projekt č. CZ.04.3.07/3.1.01.1/0051 financovaný z podpory ESF, 205-2007) a v šesti laboratořích ústavu svou středoškolskou stáž vykonávalo celkem 7 studentů z různých pražských škol pod vedením 7 vědeckých pracovníků.

Odborné praxe a ročníkové práce posluchačů středních průmyslových škol - jako každoročně ústav zabezpečil dvoutýdenní odbornou praxi několika posluchačů středních škol na svých pracovištích, převážně v odděleních zabývajících se katalýzou. Někteří studenti v ústavu pracovali i poté a zpracovali zde svou ročníkovou práci, která je součástí maturitní zkoušky.

Přednášky pro SŠ studenty a exkurse do laboratoří - v průběhu roku 2007 ústav uspořádal několik samostatných akcí pro studenty z různých středních škol (9.1. – MSPŠCH Křemencova ul. Praha 1; 15.3. – Gymnázium Pernerova Praha 8; 27.4. – MSPŠCH Křemencova ul. Praha 1; 18.6. – VOŠE v Praze 8; 20.6. - Návštěva talentovaných SŠ studentů z celé ČR v rámci Týdne fyziky pořádaného FJFI ČVUT v Praze; 27.6. – posluchači 4. a 5. ročníků PaedF UK v Praze (budoucí středoškolské učitelé chemie); 24.10. – Gymnázium Minerva v Praze 10). Celkem touto formou ústav navštívilo asi 120 studentů. Každá návštěva (2-2,5 hodiny) absolvovala přednášku o vědě v ČR a zaměření ústavu; popularizační přednášku na vybrané téma z oboru fyzikální chemie a exkurse do několika laboratoří ústavu. Na přípravě a zabezpečení programu každé návštěvy se vždy podílí okolo 10 vědeckých pracovníků a PGS studentů z různých oddělení.

Den otevřených dveří: 8. a 9.11.2007 –245 účastníků: G. Jedličkův ústav; SPŠ Panská Praha 1; Lyceum Liberec; G. a SPŠ Liberec; G. Pernerova Praha 8; G. Botičská Praha 4; MSPŠCH v Křemencově ul. Praha 1. V rámci prvního dne celoakademické akce Týden vědy a techniky ústav prezentoval program tvořený cyklem čtyř popularizačních přednášek na společné téma "Fascinace světlem - 3F: fotodisociace, fotokatalýza, fluorescence " a po té následovaly exkurse pro desetičlenné skupinky na celkem 20 různých pracovištích. Druhý den DOD pokračoval dalšími rezervovanými návštěvami středoškolských studentů. I tito návštěvníci se prostřednictvím krátké přednášky seznámili s historií a současností ústavu a poté opět navštívili některá z 20 pracovištích ústavu. Skupina hmotnostní spektrometrie zorganizovala měření analýzy dechu 45 anonymních dobrovolníků. Výsledky výzkumu (zveřejněné na webových stránkách ústavu) byly vyhodnoceny a budou publikovány v mezinárodním časopise. Akce v rámci DOD zajišťovalo celkem 45 vědeckých a odborných pracovníků ústavu a PGS studentů. Při organizování akcí pro středoškolské studenty ústav spolupracuje s Nadačním fondem Jaroslava Heyrovského.

Spolupráce pracoviště s dalšími institucemi a s podnikatelskou sférou

Společné projekty výzkumu a vývoje podpořené z veřejných prostředků - v ústavu bylo v roce 2007 řešeno 8 grantů podporovaných Ministerstvem průmyslu a obchodu:

J. Čejka, FT-TA/040: „Vývoj speciálních typů oxidačních katalyzátorů pro cílenou syntézu vonných látek II“, s VÚAnch, a.s.

Z. Sobalík, FT-TA3/064: „Vývoj struktury a technologie přípravy katalyzátorů pro současnou likvidaci NO/NO₂ a N₂O z odpadních plynů výroben kyseliny dusičné a dalších průmyslových zdrojů“, s Eurosupport Manufacturing Czechia, a.s.

M. Horáček, FT-TA3/078: "Single site" katalyzátory pro polymeraci olefinů, s VÚAnch, a.s.

S. Civiš, FT-TA4/124: „Výzkum nových metod detekce výbušnin“, s Explosia, a.s. Pardubice.

T. Navrátil, 1H-PK/42: „Výzkum a vývoj nového typu elektrochemického biosenzoru pro detekci sekvence nukleotidů v DNA a genotoxických agens v prostředí“, s BFÚ.

J. Čejka, FT-TA/042: „Vývoj progresivních typů aluminy pro speciální aplikace“, s VÚAnch, a.s.

Z. Sobalík, FI-IM/079: „Vyžití zbytkových a odpadních hlinitokřemičitanů pro výrobu stavebních hmot na bázi anorganických polymerů“, s VÚAnch, a.s.

J. Čejka, FT-TA3/080: „Syntéza titanosilikátů a jejich aplikace“, s VÚAnch, a.s.

Výsledky výzkumu a vývoje pro ekonomickou sféru - s tuzemskými subjekty bylo uzavřeno 5 hospodářských smluv, v rámci kterých vznikly následující nejvýznamnější výsledky:

V rámci spolupráce s Českým technologickým centrem pro anorganické pigmenty a.s. v Přerově byla ve smlouvě o dílo testována fotoaktivita a charakterizovány materiálové vlastnosti nově vyvíjených fotokatalyzátorů na bázi nanokrystalického anatasu (smlouva s firmou Precheza Přerov).

V rámci hospodářské smlouvy s firmou Elmarco byla připravena a charakterizována nanovlákná z oxidu titaničitého a oxidu lithno-titaničitého spinelové struktury. Podrobně bylo prostudováno chování těchto materiálů při elektrochemické inzerci lithia (smlouva se společností Elmarco, s.r.o.)

Určení povrchového složení a stavu stříbra na nosiči Al₂O₃ - materiálu testovaném pro separaci imunosupresiva Tacrolimus (FK-506). Výsledky přispěly k objasnění příčin výrazných rozdílů v účinnosti separace na závislosti na způsobu přípravy tohoto materiálu (smlouva s firmou IVAX Pharmaceuticals s.r.o., Opava).

Se zahraničními subjekty byly uzavřeny 3 smlouvy (s firmou HPL Švýcarsko; se společností CEGASA Španělsko; Fagor Španělsko).

Odborné expertizy zpracované v písemné formě pro státní orgány a instituce: celkem bylo zpracováno 102 posudků projektů (nejvíce pro agentury GAČR, GA AV ČR, AV ČR, MŠMT, MPO, Slovenská GA).

Mezinárodní vědecká spolupráce pracoviště

V rámci mezinárodní spolupráce pracoviště řešilo celkem 33 projektů: Evropská komise: Network of Excellence (1- akronym: IDECAT v rámci 6. RP) a projekty STREP a IP v rámci 6. RP (5 – akronym: NENA, HETEROMOLMAT, DeSSANS, OrgaPVNet, Organisolar); 1 projekt Network of excellence - akronym IDECAT; Marie Curie Training Site (1 – akronym INDENS); Research Training Network (1– akronym EIPAM); 1 projekt EuroPlaNet; 1 projekt EURATOM; 1 projekt International Atom Energy Agency; 9 projektů COST; 2 projekty KONTAKT; 10 dohod o dvoustranné mezinárodní spolupráci (např. s CNRS Francie, DAAD Německo, Akademií věd Egyptské arabské republiky, agenturou KOSEF Korea).

Přehled významných vědeckých výsledků dosažených v rámci mezinárodní spolupráce:

Popis kinetiky redukce NO dekanem na dusík simulující reakční podmínky exhalátů dieselových motorů – význam pro proměnné reakční podmínky v reálných systémech odpadních dieselových motorů (projekt EU 6. RP - IDECAT řešitelky B. Wichterlové). Studie iontově vyměněných forem zeolitů MCM-22 a MCM-49 z hlediska jejich využití jako adsorbenty pro zachycování CO₂. Podařilo se prokázat, že sorpční kapacita na CO₂ se zvyšuje s rostoucí koncentrací hliníku v mřížce zeolitu, čímž roste iontová kapacita pro alkalické kovy (projekt EU 6. RP - INDENS řešitele J. Čejky).

V nově vyvinutém typu elektroluminiscenčního zařízení byl jako kontakt injektující elektrony použit oxid titaničitý. Výhodné je, že zařízení nevyžaduje zapouzdření, protože druhý kontakt je kov s vysokou výstupní prací. Bylo dosaženo jasu 5700 cd/m² při napětí 8 V, což jsou slibné parametry pro další vývoj světelných zdrojů typu HYLED (projekt EU 6. RP - HETEROMOLMAT řešitele L. Kavana).

Objasnění vlivu nanočástic Au vakuově deponovaných na vysoce orientovaný pyrolytický grafit (HOPG) na rychlost jednoduché reakce přenosu elektronu. Přijatelný popis elektrodového procesu jak na HOPG, tak na Au/HOPG poskytuje model kombinující lineární difuzi s Marcusovou kinetikou (projekt EU 6. RP - NENA řešitele Z. Samce).

Výzkum srážek pomalých iontů s povrchy vedl k určení hmotnostních spekter produktů srážek kationtů a dikationtů C₇H_n⁺²⁺ (n=8,7,6) a objasnění rozpadových cest při disociaci a chemických reakcích. Studium srážek velmi pomalých (3-10 eV) kationtů CD₃⁺, CD₄⁺, CD₅⁺ s uhlíkem rozptylovou metodou umožnil určení faktoru přežití iontů, přerozdělení energie ve srážce s povrchem a stanovení efektivní hmotnosti povrchu ve srážce (Z. Herman v rámci projektů EURATOM a IAEA).

Podrobné výpočty chemisorpce N na površích Fe a absorpce N v podpovrchové oblasti byly porovnány s výpočty pro povrch Fe₄N(002). Výsledky mohou být zajímavé v katalýze, metalurgii a magnetických technologiích (Š. Pick, v rámci spolupráce s Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg a Université Louis Pasteur, Strasbourg, Francie).

Pochopení mechanismu nerezonanční vibrační excitace molekul při srážkách s elektrony - výsledkem práce je kvalitativní popis výběrových pravidel pro vibrační excitaci molekul při srážkách s elektrony. Za pomoci symetrie vibračního módu a směru vstupního vektoru lze určit pravděpodobnostní mapu směru odcházejícího elektronu (P. Čársky a R. Čurík, v rámci projektu KONTAKT ME857, spolupráce ČR-USA).

Struktura, vlastnosti a katalytické chování Fe center s ohledem na katalytickou eliminaci NO v zeolitu Ferrieritu byly studovány periodickými DFT výpočty. Výsledky studie vysvětlily mechanismus tvorby komplexů NO s Fe /Ferrieritem (Z. Sobalík, J. Dědeček, Š. Sklenák, v rámci spolupráce s Vídeňskou Universitou).

Objasnění vysoké katalytické aktivity kyselých forem zeolitů při acylaci ferocenu anhydridy organických kyselin v kapalně fázi. Bylo zjištěno, že s rostoucí velikostí pórů a s rostoucím propojením pórů roste katalytická aktivita zeolitů (J. Čejka, M. Bejblova, v rámci spolupráce se společností Chevron, USA).

Návrh nové metodiky modelování přechodů přenosu náboje a excitovaných stavů v d^6 komplexech přechodných kovů DFT technikami, a demonstrace jejich použití k popisu stavů přenosu náboje v Re(I) or Ru(II) komplexech a interpretaci fotofyzikálních a fotochemických vlastností (S. Zálíš a A. Vlček, v rámci projektu COST OC139).

Syntéza dvou látek obsahujících dvě karboranová redox centra radikálové povahy spojená ethenovým, resp. ethinovým můstkem. Elektrochemická oxidace příslušných dianiontových prekursorů ukázala, že dvě karboranové jednotky spolu elektronicky komunikují, že biradikálový produkt je stabilní, a že tyto látky lze považovat za slibné stavební kameny pro molekulární dráty (J. Ludvík, v rámci spolupráce ČR-USA, projekt KONTAKT ME785).

Analýza velikosti a rozložení energie v sonoelektrochemickém reaktoru. Numerické výpočty rozložení hustoty ultrazvukové energie umožnily najít geometrii sonoreaktoru, ve kterém intenzita ultrazvuku přesahuje hodnotu kavitačního prahu i ve velké vzdálenosti od povrchu zdroje ultrazvuku, kam lze umístit pracovní elektrodu. Teoretický model byl experimentálně potvrzen (J. Klíma, v rámci spolupráce v projektu COST D32).

Účast na mezinárodních akcích: 221 vědeckých a odborných pracovníků ústavu se v roce 2007 zúčastnilo mezinárodních konferencí. Své výsledky formou přednášek presentovalo 94 pracovníků (z toho 28 zvaných přednášek); poster představilo 127 pracovníků. V roce 2007 bylo realizováno celkem 327 zahraničních cest (včetně účasti na konferencích).

V roce 2007 ústav organizoval či spoluorganizoval 7 konferencí s mezinárodní účastí:

27th International Seminar on Modern Electrochemical Methods.

Jetřichovice, 21. – 24. 5. 2007. 68 účastníků, z toho 5 zahraničních.

40th Heyrovský Discussion - Electrochemistry in Molecules with Multiple Redox

Centers. Třešť u Jihlavy, 10. – 14.6.2007. 40 účastníků, z toho 25 zahraničních.

2nd Czech-Italian Workshop on Catalysis and Zeolites. Třešť u Jihlavy, 20. – 24.6.2007. 69 účastníků, z toho 38 zahraničních.

*3rdECHEMS Meeting - Electrochemistry in Nanosystems and Molecules at Work
Třešť u Jihlavy, 28.6.-1.7.2007. 54 účastníků, z toho 47 zahraničních.*

XXXIX Symposium on Catalysis

Praha, 5. – 6.11. 2007. 89 účastníků, z toho 15 zahraničních.

COST D36/0007/06 Working Group Meeting

Praha, 16.11.2007. 10 účastníků, z toho 7 zahraničních.

Electrochemical Seminar Prague-Dresden

Drážďany, Německo, 15. -17.11.2007. 40 účastníků, z toho 22 zahraničních.

V roce 2007 ústav navštívilo několik desítek zahraničních hostů, 30 z nich předneslo v rámci ústavních seminářů či seminářů oddělení své přednášky. Mezi nejvýznamnější hosty patřili: Harry B. Gray (California Institute of Technology), který přednesl prestižní 17. Brdičkovu přednášku; Josef Michl (University of Colorado at Boulder); Vlasta Bonačic-Koutecký (Humboldt-University Berlin); Yoshihiro Kubozono (Okayama University); Florent Xavier Gadéa (Université Paul Sabatier, Toulouse); Cong-Yan Chen (Chevron Energy Technology Co., Richmond); Jörg Enderlein (University Tübingen); Yoshikazu Suzuki (Kyoto University); Udo Buck (Max-Planck Institute Goettingen); S.E. Park (Inha University, Korea).

IV. Hodnocení další a jiné činnosti:

Vedle své hlavní činnosti ústav v roce 2007 dále vykonával správu práv ke svým patentům, licencím a zlepšovacím návrhům a zajišťoval pro pracoviště Akademie věd České republiky v areálu Mazanka závodní stravování v areálové jídelně. Svým zaměstnancům a zahraničním hostům ústav zajišťoval v případě potřeby ubytování.

V. Informace o opatřeních k odstranění nedostatků v hospodaření a zpráva, jak byla splněna opatření k odstranění nedostatků uložená v předchozím roce:

(Není relevantní)

VI. Finanční informace o skutečnostech, které jsou významné z hlediska posouzení hospodářského postavení instituce a mohou mít vliv na její vývoj:*)

Finanční informace o skutečnostech, které nastaly před rozvahovým dnem jsou uvedeny v příložené Zprávě auditora o ověření účetní uzávěrky za rok 2007 a její příloze. Po rozvahovém dni nenastaly skutečnosti, které by významně ovlivnily dosavadní hospodářské postavení instituce a její další vývoj. Růst nákladů v roce 2008 (přibližně o 10%) je plně kryt růstem objemu zejména účelových prostředků. V březnu 2008 podal ústav návrh projektu "Centrum pro inovace v oboru nanomateriálů a nanotechnologií" Operačního programu Praha Konkurenceschopnost (OPPK) s předpokládanými náklady 34,7 mil Kč, které zahrnují náklady na rekonstrukci a vybavení části 6. patra budovy ústavu.

VII. Předpokládaný vývoj činnosti pracoviště:*)

Ústav bude pokračovat v realizaci plánů Výzkumného záměru AVOZ40400503 s názvem "Struktura, reaktivita a dynamika molekulárních a biomolekulárních systémů: teorie, experiment, aplikace", který byl na základě naší žádosti prodloužen do roku 2011, a v pracích na přidělených grantových projektech. V případě udělení výše uvedeného projektu OPPK bude vybudována nová laboratoř.

VIII. Aktivity v oblasti ochrany životního prostředí:*)

Ústav zajišťuje pravidelnou likvidaci odpadů výzkumné činnosti, zejména chemikálií, a odepsané kancelářské techniky (počítačů, monitorů, tiskáren) s využitím služeb specializovaných firem. Ústav se dále řešením projektu "Stopová analýza modelových těžkých polutantů pomocí laserové fotoakustické detekce" v oddělení Chemické fyziky podílí na projektu ochrany životního prostředí oblasti Orlicko (studie znečištění ovzduší a transport škodlivin) v rámci smlouvy o spolupráci mezi AV ČR a Pardubickým krajem.

IX. Aktivity v oblasti pracovněprávních vztahů:*)

Přehled přepočtených úvazků pracovníků ústavu podle kategorií a rozdělení osobních nákladů jsou uvedeny v příloze ke Zprávě auditora o ověření účetní uzávěrky za rok 2007. Oproti roku 2006 se přepočtený počet úvazků prakticky nezměnil. Pokles úvazků pracovníků starších 65 resp. 70 let v důsledku realizace výše uvedeného usnesení Rady instituce ze 7. zasedání dne 4.5. 2008 byl kompenzován z větší části přijetím mladších pracovníků. Mzdová politika ústavu je založena na interním hodnocení efektivity vědecké činnosti jednotlivých pracovníků,

*) Údaje požadované dle § 21 zákona 563/1991 Sb., o účetnictví, ve znění pozdějších předpisů.

*) Údaje požadované dle § 21 zákona 563/1991 Sb., o účetnictví, ve znění pozdějších předpisů.

keré je podkladem pro atestační řízení. Pracovněprávní vztahy byly upraveny Kolektivní smlouvou s Odborovou organizací ústavu uzavřenou dne 20.6.2007.

Razítko

podpis ředitele instituce

Přílohou výroční zprávy je účetní závěrka a zpráva o jejím auditu