57. ZJAZD CHEMICKÝCH SPOLOČNOSTÍ

4. – 8. september 2005
Vysoké Tatry, Tatranské Matliare, hotelový komplex Hutník

USPORIADAJÚCE ORGANIZÁCIE

Asociácia slovenských chemických a farmaceutických spoločností

Asociace českých chemických společností

HLAVNÝ ORGANIZÁTOR

Slovenská chemická spoločnosť

ORGANIZAČNÝ VÝBOR

Predseda - Doc. Ing. Dušan Velič, PhD., PrifUK Bratislava
Podpredseda za SSPCH - Ing. Miloš Revús, SSPCH Bratislava
Podpredseda za SSCHI - Prof. Ing. Vladimír Báleš, DrSc., STU Bratislava
Podpredseda za SSBMB - Ing. Ján Knopp, DrSc., SAV Bratislava
Podpredseda za SFS - Prof. RNDr. Jozef Čižmárik, CSc., FaF Bratislava
Vedecký tajomník - Prof. Ing. Michal Uher, DrSc., SCHS Bratislava
Vedecký tajomník - Prof. RNDr. Pavel Drašar, DrSc., ČSCH Praha
Koordinačný tajomník - Doc. Ing. Viktor Milata, FCHPT Bratislava
Koordinačný tajomník - Prof. Ing. Martin Jambrich, DrSc., FPT TnUAD Púchov
Hospodár - Ing. Zuzana Hloušková, SAV Bratislava
Hospodár - Ing. Markéta Bláhová, ČSCH Praha
Organizačný tajomník - Doc. RNDr. Marta Sališová, CSc., PrifUK Bratislava
Výkonný tajomník - RNDr. Monika Aranyosiová, PhD., ILC Bratislava

Vážení priatelia,

v mene organizačného výboru, garantov a sponzorov je nám potešením, že ste sa rozhodli zúčastniť na našom spoločnom 57. zjazde chemických spoločností vo Vysokých Tatrách. Centrom zjazdu je hotelový komplex Hutník situovaný v Tatranských Matliaroch. Sme presvedčení, že toto miesto v malebnom tatranskom prostredí Vám poskytne nielen zaslúžený komfort, ale umožní aj prehĺbenie spoločensko-odborného charakteru zjazdu. Ide nám o vytvorenie lepších podmienok pre vzájomné posilňovanie chemického stavovstva. Z tohto dôvodu sme aj integrovali sekcie v snahe o interdisciplinárne prepojenie. Zjazd má tiež ambíciu priblížiť spojenie medzi univerzitným, akademickým a priemyselným prostredím. Skúšobnou platformou je sekcia CHEMPROGRESS so zameraním na chemické procesné inžinierstvo pod garanciou Slovenskej spoločnosti priemyselnej chémie a Českej spoločnosti priemyselnej chémie.

Tento zjazd je pokračovaním dobrej tradície slovenských a českých chemikov vo forme každoročných spoločných stretnutí. Podujatie bolo usporiadané Slovenskou chemickou spoločnosťou v organizačnej súčinnosti s Asociáciou slovenských chemických a farmaceutických spoločností a s Asociáciou českých chemických spoločností a to ako spoločný zjazd chemických spoločností. Nenahraditeľnou pomocou bola tiež podpora generálnych sponzorov - Slovnaftu, člena skupiny MOL a Zväzu chemického a farmaceutického priemyslu Slovenska, ktorým za to patrí naša úprimná vďaka. Poctou je nám i to, že záštitu nad týmto podujatím prevzal primátor mesta Vysoké Tatry Ing. Ján Mokoš.

Nedá sa nevšimnúť si, že tento zjazd prichádza s niekoľkými zmenami. Prvou zmenou je presun do hotelového komplexu s istým komfortom, ktorý predstavuje ubytovanie, plnú penziu, občerstvenie, privítaciu párty, opekačku a využitie plavárne. Hoci finančná stránka nie je nepodstatná, mám odvahu vám garantovať, že zjazd v Tatrách bude trvalou spomienkou v sérii našich spoločných zjazdov. Nepochybnou výhodou hotelového komplexu, ktorý umožňuje centrálne ubytovanie a stravovanie, je prehĺbenie spoločenského charakteru zjazdu, v spojení s plejádou pozvaných prednášajúcich, ktorí zvyšujú kvalitu i prestíž zjazdu. Druhým aspektom je predstavovanie najnovších trendov v najvyššej kvalite. Osobne chcem dúfať, že vo chvíli, keď čítate tieto riadky sa práve blížim k Tatranským Matliarom spolu s Prof. Zewailom, ktorý prisľúbil účasť a nič nezmenilo jeho plány. Prof. Zewail je nositeľom Nobelovej ceny za chémiu z roku 1999, je z Kalifornského inštitútu technológie a zaoberá sa fascinujúcim svetom femtosekundovej laserovej chémie a sledovaním chemických reakcií v reálnom čase. Tretia zmena je spojená so zrodom nového časopisu ChemZi, ktorého stránky práve listujete. Tento časopis je pokračovateľom tradície Chemických zvestí a prirodzene predstavuje partnera pre Chemické listy. Tento časopis má ambíciu pokryť potreby univerzít, akadémie a priemyslu s ohľadom na chémiu, jej výučbu, chemický výskum aj produkciu na Slovensku.

Ostáva mi už len poďakovať všetkým, ktorí pomohli pri organizovaní tohto podujatia a popriať Vám všetkým užitočný a príjemný pobyt v Tatrách.

Dušan Velič
predseda organizačného výboru

Program 57. zjazdu chemických spoločností

Hotelový komplex Hutník

Nedeľa, 4. 9. 2005

09:00 - 18:00	Registrácia účastníkov, recepcia II.
14:00 - 17:00	Organizovaný odvoz autobusmi zo železničnej stanice Poprad
19:00 - 24:00	Welcome Party, recepcia I., jedáleň a spoločenská miestnosť

Pondelok, 5. 9. 2005

08:30 - 09:00	Odvoz autobusmi z hotelového komplexu Hutník do Tatranskej Lomnice, kino Tatry
09:00 - 11:00	Otvorenie zjazdu, kino Tatry, príhovory primátora Ing. J. Mokoša, zástupcov sponzorov, predstaviteľov chemických spoločností a asociácií a funkcionárov SAV a fakúlt s chemickým profilom
11:00 - 12:00	Plenárna prednáška nositeľa Nobelovej ceny za chémiu Prof. A. Zewaila
12:00 - 12:30	Valné zhromaždenie SCHS, kino Tatry
12:30 - 13:25	Obed v hotelovom komplexe Hutník, prvý turnus
13:25 - 14:20	Obed v hotelovom komplexe Hutník, druhý turnus
14:30 - 17:55	Prednášky v sekciách, príprava posterov
18:00 - 19:00	Večera v hotelovom komplexe Hutník, prvý turnus
19:00 - 20:00	Večera v hotelovom komplexe Hutník, druhý turnus
20:00 - 24:00	Posterová prezentácia, hotelový komplex Hutník - telocvičňa, vínny večer

Utorok, 6. 9. 2005

08:30 - 11:55	Prednášky v sekciách, príprava posterov
12:00 - 13:00	Obed, prvý turnus
13:00 - 14:00	Obed, druhý turnus
14:00 - 18:00	Výlety
18:00 - 19:00	Večera, prvý turnus
19:00 - 20:00	Večera, druhý turnus
20:00 - 24:00	Posterová prezentácia, hotelový komplex Hutník - telocvičňa, pivný večer

Streda, 7. 9. 2005

08:30 - 11:55	Prednášky v sekciách
12:00 - 13:15	Obed, prvý turnus
13:15 - 14:30	Obed, druhý turnus
14:30 - 17:55	Prednášky v sekciách
18:00 - 19:00	Odvoz autobusmi z hotelového komplexu Hutník na Medvediu lúku
19:00 - 24:00	Opekačka pri muzike, vyhodnotenie najlepších posterov, Medvedia lúka

Štvrtok, 8. 9. 2005

08:30 - 11:55	Prednášky v sekciách, panelová diskusia ako záver 57. zjazdu chemických spoločností
12:00 - 14:30	Obed a odchod

SEKCIE ZJAZDU A GARANTI

1. **Analytická a fyzikálna chémia**
(Analytická chémia, Fyzikálna chémia, Teoretická chémia, Jadrová chémia, Elektrochémia, Fotochémia, Chromatografia, Chemometria, Molekulové modelovanie, Počítačová chémia, Laserová chémia, Molekulárna spektroskopia, Chemická fyzika)

Prof. Ing. Ján LABUDA, DrSc. *FCHPT STU, Bratislava*
Prof. RNDr. Andrej STAŠKO, DrSc. *FCHPT STU, Bratislava*

2. **Anorganická a materiálová chémia**
(Anorganická chémia, Chémia materiálov, Íly, Nanotechnológia, Mechanochémia, Úprava povrchov, Biomateriály)

Prof. Ing. Marián KOMAN, DrSc. *FCHPT STU, Bratislava*
RNDr. Milan DRÁBIK, CSc. *SAV, Bratislava*

3. **Organická chémia a polyméry**
(Organická chémia, Polyméry, Vlákna, textil a fólie, Sacharidy a glykokonjugáty, Farmaceutická chémia, Drevo, celulóza a papier)

Doc. Ing. Viktor MILATA, CSc. *FCHPT STU, Bratislava*
Ing. Mária OMASTOVÁ, PhD. *SAV, Bratislava*

4. **Vyučovanie a história chémie**
(Vyučovanie chémie, História chémie, Prezentácia chémie verejnosti, Chemická informatika)

Prof. RNDr. Peter SILNÝ, CSc. *PRIF UK, Bratislava*
Prof. RNDr. Jozef ČÁRSKY, CSc. *LF UK, Bratislava*

5. **Životné prostredie a biotechnológia**
(Životné prostredie, Biotechnológia, Biochémia, Potravinárska chémia, Toxikológia, Rádioekológia, Molekulárna Biológia)

Prof. Ing. Vasil KOPRDA, DrSc. *FCHPT STU, Bratislava*
Doc. Ing. Štefan SCHMIDT, PhD. *FCHPT STU, Bratislava*

6. **CHEMPROGRESS**
(Priemyselné inžinierstvo, Technológie, Prepojenie vedy a priemyslu)

Prof. Ing. Vendelín MACHO, DrSc. *FPT TnUAD, Púchov*
Prof. Ing. Jiří HANIKA, DrSc. *AV ČR, Praha*

ZOZNAM POZVANÝCH PREDNÁŠOK

Sekcia 1 - Analytická a fyzikálna chémia

1PP1	*J. Barek*	Kam směřuje elektroanalytická chemie
1PP2	*J. Noga*	Smerom ku spektroskopickej presnosti pri kvantovochemických výpočtoch
1PP3	*D. Kaniansky*	Analytická chémia na čipoch
1PP4	*Z. Havlas*	Relativistické efekty v organických biradikálech

Sekcia 2 - Anorganická a materiálová chémia

2PP1	*J. Pinkas*	Od molekulárních prekurzorů k materiálům
2PP2	*M. Melník*	Coordination and bio-coordination chemistry: The past, present and future
2PP3	*P. Komadel*	Smektity, chemicky zaujímavé ílové minerály
2PP4	*I. Štich*	Hrotom indukované procesy: nanomanipulácia a mechanochémia

Sekcia 3 - Organická chémia a polyméry

3PP1	*Š. Marchalín*	Nové trendy v chémii dihydropyridínov
3PP2	*I. Chodák*	Biodegradovateľné plasty - súčasný stav a perspektívy pre vysokotonážne aplikácie
3PP3	*A. Boháč*	Medicínska chémia vo vývoji nových typov kancerostatík - inhibítory angiogenézy
3PP4	*K. Ulbrich*	Polymerní systémy pro přípravu protrahovaných a cílených forem léčiv

Sekcia 4 - Vyučovanie a história chémie

4PP1	*I. Herčko*	Ignác Anton Born a prvý európsky vedecký zjazd chemikov a metalurgov v Sklených Tepliciach v roku 1786
4PP2	*B. Brestenská*	Premena tradičnej školy na modernú školu 21. storočia
4PP3	*P. Drašar*	Koncepce chemického eurobakaláře
4PP4	*J. Garaj*	Pozitívne a negatívne trendy v chemickom vzdelávaní

Sekcia 5 - Životné prostredie, potravinárstvo a biotechnológia

5PP1	*D. Hudecová*	Toxinogénne huby a mykotoxíny v životnom prostredí
5PP2	*F. Macášek*	Cyklotrónové iónové zväzky in vitro a in vivo
5PP3	*J. Kormanec*	The role of sigma factors of RNA polymerase in stress response, pathogenicity and differentiation of bacteria
5PP4	*J. Čopíková*	Využití fyzikálně-chemických metod pri sledování kvality čokoládových a nečokoládových cukrovinek

Sekcia 6 - CHEMPROGRESS

6PP1	*D. Budzák*	Aspekty rozvoja vláknitých materiálov vo svete a u nás
6PP2	*J. Pašek*	Několik poznámek k vývoji chemicko-technologických procesů
6PP3	*M. Králik*	Perspektívy využitia výskumu v chémii

ZOZNAM PREDNÁŠOK PODĽA SEKCIÍ

Sekcia 1 - Analytická a fyzikálna chémia

1P01	*P. Ševčík, D. Mišicák, Ľ. Adamčíková*	Produkcia oxidu uhličitého v oscilačnej, Belousov - Žabotinského reakcii s kyselinou oxálovou
1P02	*T. Navrátil, Z. Šenholdová, K. Přistoupilová, T. I. Přistoupil, M. Heyrovský*	Využití voltametrie ke sledování metabolismu cysteinu v lidském organismu
1P03	*I. Valent, A. Zahradníková, I. Zahradník*	Modelovanie dynamiky pufrovania Ca^{2+} iónov v dyáde bunky srdcového svalu
1P04	*L. Trnková, R. Rozik, J. Topinková, L. Zerzánková*	Analytické aplikace eliminační voltametrie
1P05	*T. Bystroň, K. Bouzek, P. Holzhauser*	Potenciálově modulovaná výměna iontů v polypyrrolovém filmu
1P06	*K. Bouzek, S. Moravcová, P. Holzhauser, R. Kodým*	Vodivé polymery jako nosiče katalyzátoru v nízkoteplotních palivových článcích
1P07	*J. Klíma*	Sonochemie: simulace rozložení intenzity ultrazvuku a optimalizace tvaru ultrazvukového reaktoru
1P08	*J. Vojtko*	Štúdium rýchlostí esterifikácie
1P09	*J. Mosinger, K. Lang, D. M. Wagnerová*	Supramolekulární sensitizery
1P10	*A. Bednáriková, R. Oriňáková, K. Markušová, D. Kladeková*	Optimalizácia podmienok vylučovania PMMA povlaku na častice Fe prášku
1P11	*R. Kodým, H. Bergmann, K. Bouzek*	Modelování cely pro přímou elektrochemickou dezinfekci pitné vody
1P12	*J. Polák, O. Mestek, R. Koplík, J. Šantrůček, M. Kodíček*	Speciační analýza stopových prvků v potravinách rostlinného původu
1P13	*R. Ovádeková, K. Špirková, S. Jantová, J. Labuda*	Novel electrochemical method for the sensitive determination of damage to DNA with carbon nanotubes-based biosensor
1P14	*I. Švancara, M. Galík, T. Mikysek, L. Baldrianová, E. Tesařová, K. Vytřas*	Vybrané kapitoly z elektroanalýzy na uhlíkových pastových elektrodách
1P15	*D. Milde*	Možnosti atomové absorpční spektrometrie v analýze klinických materiálů
1P16	*D. Dvoranová, V. Brezová, M. Valko*	EPR study of photochemical processes in carotenoids
1P17	*J. Matoušek, P. Kulhánek, M. Čajan, J. Koča*	Kvantově-chemická studie reorganizace sítě vodíkových vazeb v molekule calix[4]arenu
1P18	*M. Mazur, J. Moncol, M. Valko*	Quantitative EPR spectroscopy - an accurate positioning of each sample in the cavity is essential
1P19	*J. Ludvík, J. Roháčová, I. Hoskovcová, D. Dvořák*	Elektrochemické studium intramolekulárních elektronických interakcí v aminokarbenových komplexech chromu
1P20	*I. Bugár, M. Žitňan, D. Velič, G. Čík*	Femtosekundová laserová spektroskopia fluorescenčných vlastností polytiofénov
1P21	*J. Pavlovský, P. Jelínek*	Alkalické silikátové roztoky vodních skel, struktura těchto roztoků a její význam pro chemickou a fyzikální konverzi sol-gel
1P22	*V. Kanický, L. Zaorálková, A. Hrdlička, V. Otruba*	Laser ablation inductively coupled plasma spectrometry for depth profile analysis of metal and ceramic coatings
1P23	*J. Benko, O. Vollárová, I. Černušák, M. Lácová, Z. Benková, M. Aranyosiová*	Príprava a vlastnosti nových derivátov 2-etoxychromónov
1P24	*I. Černušák, O. Kirdajová, O. Vollárová, J. Benko, M. Uhlár*	Interactions of monovalent cations with acetonitrile

Sekcia 2 - Anorganická a materiálová chémia

2P01	*J. Löbl, J. Pinkas*	Příprava a charakterizace nových derivatů alumazenu
2P02	*R. Boča*	Molecule-based magnets
2P03	*Ľ. Žúrková, E. Rakovský, R. Gyepes, P. Schwendt, Z. Mička*	Kryštalochemické aspekty anorganicko-organických hybridných zlúčenín na báze oxovanadičnanov
2P04	*J. Vinklárek, J. Honzíček, H. Poláčková, J. Holubová*	Cytostaticky aktivní vanadocenové komplexy
2P05	*O. Kubová, V. Švorčík*	Vrstvy uhlíku a jejich využití ve tkáňovém inženýrství
2P06	*I. Ondrejkovičová, J. Malo, S. Galková, T. Lis*	Tiokyanáto-železité a železnaté komplexy

2P07	*P. Segľa, D. Mikloš, J. Jašková, M. Koman, M. Melník*	Synthesis, spectral proporties and crystal structures of copper(II) pyridinedicarboxylate adducts with chelating ligands
2P08	*P. Stachová, M. Korabik, M. Koman, M. Melník, J. Mrozinski, M. Mazúr, D. Valigura*	Štruktúra a vlastnosti nitrozobenzoátomeďnatých komplexov s ronikolom
2P09	*D. Valigura, P. Stachová, M. Koman, D. Mikloš, M. Melník, D. Hudecová, M. Miko*	Benzoáto a salicylátomeďnaté komplexy - štruktúra, vlastnosti a ich perspektívy
2P10	*M. Koman, M. Melník*	The structural study of selected copper(II) carboxylates with tridentate chelating ligands
2P11	*Z. Klika, L. Kraus, D. Vopálka*	Zachycování Cs na bentonitech - adsorpce nebo iontová výměna?
2P12	*F. Kovanda, T. Rojka, K. Jirátová, L. Obalová, T. Grygar*	Směsné oxidy připravené tepelným rozkladem Co-Mn-Al hydrotalcitů a jejich katalytické vlastnosti
2P13	*B. Doušová, M. Filippi, A. Martaus, D. Koloušek, V. Machovič*	Stabilita forem arsenu v čistých a kontaminovaných zeminách
2P14	*P. Novotná, J. Krýsa*	Anorganicko-organické vrstvy na skle
2P15	*D. Švadlák, J. Málek*	Příme sledování kinetiky růstu krystálů Sb_2S_3 ve sklovité matrici $(GeS_2)_{0,2}$ $(Sb_2S_3)_{0,8}$
2P16	*M. Vlček, S. Schroeter, A. Fišerová, R. Poehlmann*	Tvorba mikro- a nanostruktur v amorfních chalkogenidech a aplikace jevu
2P17	*T. Podgrabinski, P. Slepička, V. Švorčík*	Charakterizace tenkých polymerních vrstev připravovaných metodou spin coating
2P18	*P. Lošťák, Č. Drašar, Z. Zhou, C. Uher*	Some properties of the novel diluted magnetic semiconductors $Sb_{2-x}V_xTe_3$
2P19	*I. Jiříček, J. Hilbert, J. Macák, V. Polívka*	Steam chemistry impact on materials in power generation
2P20	*M. Drábik*	Možnosti a limity termickej analýzy v chémii materiálov
2P21	*K. Kolářová, V. Švorčík*	Biokompatibilita modifikovaného polyethylenu
2P22	*D. Havlíček, O. Kaman, Z. Macháčková*	K protonové vodivosti kyselých fosforečnanů vybraných organických bází
2P23	*L. Koudelka, J. Jirák, P. Mošner L. Montagne, G. Palavit*	Struktura a vlastnosti lithium-zinečnatých borofosfátových skel
2P24	*A. E. Pavlath*	Biodegradable household materials

Sekcia 3 - Organická chémia a polyméry

3P01	*J. Kvíčala, O. Baszczyňski, D. Hořčicová*	Příprava a reakce C_2-symetrických dibromidů
3P02	*W. Dmowski*	The Application of Halotane and Sodium Dithionite to the Synthesis of Compounds Containing the Trifluoromethyl group
3P03	*Z. Severa, J. Krupka*	Vliv přítomnosti nekorespondujících aminů na kinetiku hydrogenace nitrilů
3P04	*P. Jansa, V. Macháček*	Efektivní syntézy opticky čistých derivátů kyseliny 1,2,3,4-tetrahydroisochinolin-3-karboxylové
3P05	*M. Repovská, P. Kutschy*	Syntéza analógov nukleozidov odvodených od indolových fytoalexínov
3P06	*P. Hrdlovič, Š. Chmela, M. Danko, M. Sarakha, G. Guyot*	Spectral Characteristics of Probes Based on Benzothioxanthone and Hindered Amine in Solution and in Polymer Matrices
3P07	*J. Spěváček*	Studium teplotou-indukované fázové separace ve vodných roztocích polymerů NMR spektroskopií
3P08	*D. Berek, M. Šnauko*	Liquid Chromatography of Synthetic Polymers under Limiting Conditions of Adsorption or Desorption
3P09	*P. Janderka, P. Ostřížek, M. Gernátová*	Použití nafionové membrány v membránovém vstupu hmotnostního spektrometru
3P10	*M. Hrubý, T. Etrych, J. Kučka, K. Ulbrich*	Polymerní nosiče léčiv s hydroxybisfosfonátovými skupinami pro cílený transport do kostní tkáně
3P11	*L. Dušek, R. Hrdina, L. Burgert*	Sulfonované deriváty DPP pigmentů a možnosti jejich průmyslového využití
3P12	*P. Tomasik*	Polysaccharides and Development of Chemical Industry in Approaching Half-century
3P13	*J. Młochowski, M. Brząszcz, M. Giurg, H. Wojtowicz*	Recoverable Organoselenium Catalysts
3P14	*M. Kuchař*	Některá úskalí současného výzkumu a vývoje léčiv

3P15	*J. Hlaváček, P. Niederhafner, V. Gut, H. Hulačová, P. Maloň*	Synthesis of bis-Cystinyl Fragments of Human IgG1 Hinge Region in Solution and on the Solid and Soluble Polymers
3P16	*M. Špírková, M. Šlouf, O. Bláhová, T. Farkačová*	Povrchové vlastnosti nanokompositních nátěrů
3P17	*I. Krupa, T. Nedelčev, A. Kleinová, I. Novák*	Povrchová modifikácia polyolefínov očkovaním organofunkčnými silánmi
3P18	*P. Sysel, T. Koptíková, H. Kompertová, R. Čechová, M. Fryčová*	Polyimidy na bázi 1,3-xylylendiaminu
3P19	*R. Čabla, M. Obadal, K. Stoklasa*	Cold-Crystallization of Syndiotactic Polystyrene
3P20	*J. Rychlý, L. Matisová-Rychlá, V. Bukovský, M. Pleteníková, S. Katuščák*	Vplyv deacidifikácie lignín-obsahujúceho papiera na jeho stabilitu pri mechanickej a termo-oxidačnej degradácii-využitie chemiluminiscenčnej metódy pri hodnotení niektorých vlastností
3P21	*J. Hanusek, M. Sedlák, L. Hejtmánková*	Tandemové recyklizační reakce isothiouroniových solí odvozených od pyrrolidin-2-onu a piperidin-2-onu
3P22	*P. Šimůnek, M. Pešková, V. Bertolasi, V. Macháček, A. Lyčka*	New Method of Preparation of 1-Aryl-4-amino-5- aryldiazenylpyridazinium salts
3P23	*S.M. Aqeel, D. Lath*	Thermodynamic Compatibility of poly(n-hexyl methacrylate) -Polymethylene System
3P24	*P. Zuman*	Kovalentní hydratace některých karbonylových a azomethínových skupin

Sekcia 4 - Vyučovanie a história chémie

4P01	*J. Čársky, J. Zálešáková*	História výskumu prírodných minerálnych liečivých vôd na Slovensku
4P02	*M. Melník*	Women in science
4P03	*M. Bílek, P. Opatrný, O. Řádková*	Integrační tendence ve vyuce přírodovědných předmetů: příležitost nebo hrozba pro výuku chemie?
4P04	*M. Marek, K. Myška, K. Kolář*	Využití vzorců a modelů ve výuce chemie
4P05	*V. Sirotek, M. Kraitr, P. Kutnerová*	Problematika výpočtových úloh ve výuce chemie
4P06	*M. Feszterová*	Orientácia študentskej vedeckej odbornej aktivity na územnú ochranu prostredia v okolí závodu Duslo, a.s. Šaľa
4P07	*M. Ganajová, M. Lichvárová*	Efektívnosť ďalšieho vzdelávania učiteľov chémie na Slovensku prostredníctvom dištančnej vzdelávacej technológie
4P08	*B. Dušek, M. Novák*	Interaktivní centra poznávání
4P09	*H. Čtrnáctová*	Chemické vzdělávání a moderní technologie
4P10	*M. Klečková, T. Nevěčná, V. Fadrná, P. Topičová*	Asistent učitele, rozšíření pedagogické praxe budoucích učitelů chemie
4P11	*B. Kratochvíl*	Pilulka - dobro i zlo!
4P12	*M. Kraitr, V. Sirotek, V. Richtr, V. Nápravník*	Krátkodobý studijný pobyt ve výrobních závodech jako součást dalšího vzdělávání učitelů chemie
4P13	*J. Valkovič, M. Sališová*	Alternatívne formy vyučovania organickej chémie na stredných školách
4P14	*A. E. Pavlath*	Public image of chemistry
4P15	*J. Veřmiřovský, M. Vrkočová*	E-learning v diagnostické fázi VVP na základní a střední škole

Sekcia 5 - Životné prostredie, potravinárstvo a biotechnológia

5P01	*G. Holéczyová, V. Vojteková, K. Rimárová, A. Hudák*	Monitoring of the element contaminants in the environmental samples
5P02	*L. Svoboda*	Řízení environmentálních dopadů aplikace průmyslových hnojiv
5P03	*J. Tomáš, D. Bajčan, A. Vollmannová, D. Zaujec, K. Jomová*	Rizikové prvky okolia Rudnian a Krompách
5P04	*S. Bartusek, S. Brožová*	Plasma heating for processing the metal-bearing oxidis wastes
5P05	*J. Kalina, V. Špunda*	Použití analytických metod při studiu stavu fotosyntetického aparátu pod vlivem globálních klimatických změn
5P06	*Z. Dvořák, R. Vrzal, J. Ulrichová*	CYP1A1 expresssion in primary cultures of rat hepatocytes and Hep62 is restricted by microtubules disruptors
5P07	*S. Sekretár, Š. Schmidt, L. Zahradníková*	Úloha obalov pri balení a skladovaní potravín
5P08	*J. Bystrická, M. Timoracká, A. Vollmannová, S. Melicháčová, B. Škarbová*	Polyphenolic compounds in coloured pea seeds
5P09	*I. Valterová, L. Cahlíková, A. Luxová, B. Kalinová O. Hovorka*	Samčí značkovací feromony čmeláků, jejich isolace a biosyntéza

5P10	*T. Zoufalý, P. Brynych*	Český pivovárek a jeho výrobek uprostřed oceánu
5P11	*P. Kafarski*	Derivatives of aminomethylenebisphosphonic acid - chemistry and biology
5P12	*V. Koprda*	Technológie pre rádioaktívne odpady a vyraďovanie jadrových zariadení
5P13	*M. Lučaníková, J. Kučera, F. Šebesta*	Použitie pevných extrahentov v rádiochemickej neutrónovej aktivačnej analýze
5P14	*P. Kotianová, H. Puxbaum*	n-Alkanes and polyaromatic hydrocarbons in aerosol samples
5P15	*T. Tóth, R. Pospišil, K. Pariláková, J. Musilová, J. Bystrická*	Distribúcia ťažkých kovov v pôdach aplikáciou substrátu po výrobe bioplynu
5P16	*J. Karovičová, Z. Kohajdová, D. Lukáčová, M. Greifová, K. Kukurová, J. Lehkoživová*	Fermentation of cabbage-apple juices by Lactobacillus plantarum and Bifidobacterium longum
5P17	*F. Pudil, P. Šrůta, R. Uvíra, M. Maryška, V. Janda*	Deriváty hydrazinu v ucháči Neuwirthovu (Gyromitra Neuwirthii)
5P18	*A. Hegedűsová, O. Hegedűs, K. Jomová, T. Tóth, A. Vargová*	Zdroje selénu vo výžive obyvateľstva Nitrianskeho kraja
5P19	*J. Musilová, R. Stanovič, J. Bystrická, L. Lahučký, P. Trebichalský*	Hygienický stav vybraných pôdnych predstaviteľov z hľadiska obsahu ťažkých kovov v regiónoch bez lokálneho znečistenia
5P20	*G. Greif, M. Greifová, J. Karovičová*	Analysis of biogenic amines in foods and their production by some strains bacteria
5P21	*A. Vollmannová, J. Tomáš, T. Tóth, M. Timoracká, B. Škarbová*	Zmeny obsahu vybraných flavonoidov v zelenom hrášku vo vzťahu k dobe mrazenia
5P22	*O. Hegedűs, A. Hegedűsová, A. Vargová*	Stanovenie obsahu selénu viazaného v proteínovej frakcii
5P23	*H. Parschová, Z. Matějka, K. Jurečková, P. Krotká, K. Bláha*	Sorpce oxoaniontů vanadu na standardním slabě bazickém anexu a sorbentu s amino-methyl-glucitolovou funkční skupinou
5P24	*Š. Schmidt, J. Hojerová, F. Görner*	Minulosť a súčasnosť potravinárstva na fakulte chemickej a potravinárskej technológie

Sekcia 6 - CHEMPROGRESS

6P01	*P. Zámostný, L. Starkbaumová, Z. Bělohlav, T. Herink, V. Chyba, J. Šimek, J. Lederer*	Laboratórní pyrolýza zbytkové C9 frakce
6P02	*M. Olšovský, P. Gášek. J. Cingelová, R. Brescher, V. Macho*	Vplyv kovov alkalických zemín na vulkanizáciu nenasýtených kaučukov a fyzikálno-mechanické vlastnosti vulkanizátov
6P03	*L. Anděl, M. Šafářová, J. Kusý*	Fyzikálně chemický zpusob recyklace odpadního polyethylentereftalátu
6P04	*J. Poživil, V. Hanta*	Využití simulačných programu při analýze chemických procesů
6P05	*A. E. Pavlath*	Alternate energy resources
6P06	*V. Macho, M. Králik, M. Olšovský, J. Horniaková, D. Mravec*	Príprava cyklických alkylénkarbonátov za miernych reakčných podmienok
6P07	*A. Mlčoch*	Rozvoj anorganických pigmetů
6P08	*L. Břenková, Z. Bělohlav, P. Durdil, J. Hanika, J. Kalčíková, V. Tomášek*	Optimalizace procesu mokré granulace využitím fuzzy logiky
6P09	*B. Cíbik, V. Macho, A. Hanzlíková*	Vplyv modifikácie gumovej drviny ako potenciálneho plniva gumárskych zmesí
6P10	*M. Šimíčková, V. Tukač, V. Chyba, J. Lederer, J. Kolena, J. Šimek, J. Hanika*	Hydrogenace styrenu v pilotním zkrápěném reaktoru
6P11	*H. Kittel, J. Sváta*	Vývoj a vzájemná konkurence automobilového benzínu a motorové nafty jako rozhodujúcich paliv pro automobily
6P12	*J. Sýkorová, M. Jambrich, A. Murárová, Ľ. Hajduchová, M. Šiarnik*	Štruktúra a vlastnosti bytových textílií zo zmesi nových typov vlákien
6P13	*V. Hanta, J. Poživil*	Multiproduct batch processes as discrete event systems
6P14	*L. Červený*	Výzkum a výroba synthetických vonných látek v ČR
6P15	*L. Starkbaumová, P. Zámostný, Z. Bělohlav*	Laboratórní pyrolýza naftenických uhlovodíků
6P16	*H. Mäsiar, N. Kaloforov*	Neaditívne vysoký účinok veľmi malých množstiev polyetylénoxidu s molekulovou hmotnosťou 600 000 na priedušnosti a zmena ďalších technologických vlastností zlievárenských ílových formovacích zmesí
6P17	*J. Patera, J. Krupka, K. Jirátová*	Příprava Pd/Al_2O_3 katalyzátoru mikoemulzní technikou
6P18	*M. Večeřa, L. Prokůpek, L. Svoboda*	Polymery jako nosiče identifikačních tělísek
6P19	*M. Paidar, S. Moravcová, K. Bouzek*	Použití Nafionové membrány modifikované vodivými polymery v palivovém článku typu PEM

6P20	*J. Hanika*	Applied Research in the Institute of Chemical Process Fundamentals, Academy of Sciences of the Czech Republic (ASCR), Prague
6P21	*M. Polovka, J. Pigošová, K. Vizárová, S. Kirschnerová, L. Bieliková, M. Vrška*	The application of FTIR spectroscpy on characterization of paper samples, modified by bookkeeper process
6P22	*P. Kuráň, J. Burdová, P. Janoš*	Některé aspekty analýzy těkavých halogenovaných organických látek ve vodě
6P23	*S. Moravcová, K. Bouzek*	Polypyrrol vs. polyanilin jako nosič katalyzátoru v palivových článcích typu PEM
6P24	*M. Řičánek, A. Církvová*	Eurosupport Manufacturing Czechia-nový hráč v oblasti výroby katalyzátorů

ZOZNAM POSTEROV PODĽA SEKCIÍ

Sekcia 1 - Analytická a fyzikálna chémia

1Po01	*D. Bajerová, V. Maier, J. Horáková, J. Petr, D. Drahoňovský, J. Ševčík*	Měření kritické micelární koncentrace kationaktivního tenzidu kapilární elektroforézou
1Po02	*J. Bajuszová, S. Ružičková, L. Koller, M. Matherny, K. Flórián*	Non-controlled and controlled dc arc at the evaporation of powder samples at the spectrography and spectrometry
1Po03	*P. Banáš, M. Otyepka, Z. Prokop, J. Damborský*	Studium ad_n reakčního kroku enzymů halogenalkandehalogenáz metodami teoretické chemie
1Po04	*Z. Weishauptová, V. Machovič, L. Borecká*	Identifikace hydratovaného oxidu zirkoničitého na korozní vrstvě slitiny zirkonu
1Po05	*R. Buchtík, V. Magnus, M. Zatloukal, M. Strnad*	New heavy labelled auxins for mass spectrometry
1Po06	*M. Čajan, Z. Trávníček*	The structure and stability of Co(II) and Fe(III) complexes with *N6*-substituted adenine derivatives: A DFT Study
1Po07	*V. Szöcs, T. Pálszegi, V. Lukeš, J. Sperling*	Theoretical analysis of symmetric dimer systems: absorption and 2D photon echo electronic spectra
1Po08	*Z. Cílová, K. Bouzek, S. Moravcová, J. Schauer*	Transportní vlastnosti nových heterogenních membrán na bázi sulfonovaného poly(fenylensulfidu)
1Po09	*K. Čížek, J. Barek, J. Zima*	Detekce stopových množství 3-aminofluoranthenu a 3-nitrofluoranthenu pomocí borem dopovaných diamantových elektrod
1Po10	*M. Rievaj, Z. Dovalovská, D. Bustin*	Trace analysis of lead in small volume samples by anodic stripping voltammetry with collection at interdigitated microelectrodes
1Po11	*I. Popa, L. Dvořák, J. Mikulík, Z. Trávníček*	Biologicky aktivní Fe (III) komplexy s cytokininovými deriváty
1Po12	*T. Fazekaš, J. Oremusová, M. Ivková*	Štatistické porovnanie kvality merania u rôznych typov ISE a posúdenie vplyvu ich starnutia v podmienkach rutinných stanovení
1Po13	*Z. Fečková, L. Lux, Ľ. Pikna*	Sledovanie zmien korózneho potenciálu systému Fe prášok / povlak niklu
1Po14	*J. Gabčová, V. Danielik*	Elektrochemické vylučovanie lantánu
1Po15	*M. Gál, M. Medová*	Voltammetric and HPLC-UV-VIS determination of paclitaxel in the presence of hyaluronic acid
1Po16	*E. Hauserová, K. Dolezal, M. Hajduch, M. Strnad*	Pharmacokinetic study of cytokinin-derived compounds in murine blood samples
1Po17	*M. Heželová, D. Kladeková, L. Lux*	Použitie permeabilných reakčných bariér na ozdravenie kontaminovaných spodných vôd
1Po18	*J. Hilbert, I. Jiříček, E. Lundanes*	Size exclusion analysis of organic matter in power plant water
1Po19	*Z. Hoherčáková, V. Jurka, P. Tůma, F. Opekar*	Mikrofluidní analytický systém pro monitorování aminokyselin v biologických tekutinách: příprava předlohy pro odlévání plastových mikročipů
1Po20	*L. Husáková, J. Šrámková*	Matrix modification for the determination of selected metals in urine by D_2-GFAAS
1Po21	*J. Chovancová, J. Chomoucká, M. Veselý*	Preparation and characterization of transparent TiO_2 coated glass
1Po22	*P. Jenčušová, P. Tomčík, D. Bustin, M. Rievaj*	Využitie chronoampérometrie prechodových prúdov IDA mikroelektródy na bezkalibračné stanovenie elektroaktívnych látok
1Po23	*S. Kedžuch, J. Noga*	Alternatívna formulácia r12 prístupu s použitím pomocnej bázy pre podmienku úplnosti
1Po24	*M. Klučáková, O. Pilný, P. Sedláček*	Rozpustnost huminových kyselin ve vodných roztocích
1Po25	*Z. Kolská, J. Cihlář, V. Růžička, M. Zábranský*	Aplikace matematické statistiky v odhadových metodách pro určení fyzikálně chemických vlastností čistých organických látek
1Po26	*P. Kosina*	HPLC analýza alkaloidů argemonového oleje
1Po27	*R. Ovádeková, I. Štepánek, J. Labuda*	DNA-modified screen-printed carbon electrode applied to the study of interaction between inorganic arsenic compounds and DNA at the electrode surface
1Po28	*A. Lišková, L. Křivánková, M. Blešová*	Štúdium disociačných konštánt a rozdeľovacích koeficientov látok s potenciálnym účinkom na zlepšenie kognitívnych funkcií
1Po29	*E. Machníková, M. Bazzaoui, J. I. Martins, V. Machovič, I. Jiříček*	Corrosion resistance of electrochemically synthesized polypyrrole coating on stainless steel substrate
1Po30	*Z. Mácová, K. Bouzek, K. - M. Jüttner*	Studie vlivu kationtu roztoku hydroxidu alkalického kovu na elektrochemickou syntézu železanu
1Po31	*R. Maršálek*	Vliv povrchově aktivních látek na zeta potenciál uhlíkatých materiálů
1Po32	*R. Mikulíková, R. Winterová, D. Flodrová*	Využití GC-MS/SPME při analýze ovocných destilátů

1Po33	*J. M. Milczarek, G. Zadora, J. Zięba-Palus, P. Kościelniak*	Diagnostic examinations of car paints by the Py-GC-MS method for forensic purposes
1Po34	*M. Milko, Š. Varga, J. Noga*	Density fitting hartree calculations in solids
1Po35	*D. Mišicák, P. Ševčík, Ľ. Adamčíková*	Vznik priestorových štruktúr v systéme aspirín-bromičnan
1Po36	*P. Mořkovská, M. Hromadová, L. Pospíšil, S. Giannarelli*	Fate of the nitro anion radical of pesticide bifenox in non-aqueros systems. Double-layer effects in tetraalkylammonium solutions
1Po37	*P. Možíšková, J. Zita, M. Veselý*	Effect of hole scavenger on the photocatalytic reduction of silver ions
1Po38	*B. Yosypchuk, T. Navrátil*	Pevné amalgamové elektrody jako alternativa ke kapalným rtuťovým elektrodám
1Po39	*Z. Navrátilová, L. Vaculíková*	Electrodeposition of metals on clay modified electrodes
1Po40	*I. Němcová, E. Caisová, B. Kafková, J. Sejbal, K. Nesměrák*	The effect of cyclodextrins on the physico-chemical properties of thioacridine derivatives
1Po41	*J. Soukupová, L. Kvítek, A. Panáček, T. Nevěčná*	Vliv povrchově aktivních látek na přípravu koloidních částic stříbra chemickou redukcí stříbrné soli
1Po42	*F. Novák, V. Machovič, J. Poledna*	Determination of carboxyl groups in humic acids by FTIR spectrophotometry
1Po43	*O. Novák, R. Lenobel, K. Doležal, M. Strnad*	New chromatographic and mass spectrometric approach for cytokinin analysis
1Po44	*A. Olexová, M. Mrákavová, M. Melicherčík, Ľ. Treindl*	Modifikovaná Brayova - Liebhafského oscilačná reakcia založená na oxidácii jodidových iónov peroxidom vodíka v kyslom prostredí
1Po45	*R. Opatřilová, P. Mokrý, L. Bartošová*	Charakteristika a vlastnosti nového potenciálního léčiva
1Po46	*J. Oremusová, O. Greksáková*	Konduktometrické štúdium termodynamiky micelizácie benzetóniumchloridu v sústavách (voda - kosolvent)
1Po47	*J. Oslanská, M. Aranyosiová, E. Chmielewska, D. Chorvát, D. Velič*	Povrchová analýza a hĺbkový profil chemicky modifikovaných zeolitov
1Po48	*E. Otyepková, M. Otyepka, Z. Prokop, M. Boháč, P. Jeřábek, T. Nevěčná, J. Damborský*	Srovnání průběhu nekatalyzované S_N2 reakce acetátového iontu s 1,2-dichlorethanem a 1,2-dibromethanem s reakcí katalyzovanou enzymem halogenalkandehalogenázou
1Po49	*M. Pechová, V. Maier, J. Horáková, J. Petr, D. Drahoňovský, J. Ševčík*	Separace tricyklických antidepresiv kapilární elektroforézou
1Po50	*K. Pecková, A. Rumlerová, J. Zima, J. Barek*	Studium elektrochemického chování meso-tetrakis(4-sulfophenyl) porfyrinu s využitím polarografických a voltametrických metod na rtuťových elektrodách
1Po51	*M. Pekař, M. Krbová*	Viskozimetrie alkalických roztoků humátů
1Po52	*P. Petrovič, I. Valent*	Modelovanie iónového kanála DHPR metódou Monte Carlo
1Po53	*J. Pigošová, E. Klein, Z. Cibulková, V. Lukeš*	FTIR study of gamma-irradiated *cis*-1,4-polyisoprene
1Po54	*Ľ. Pikna, L. Lux, L. Trnková*	Využitie eliminačnej voltampérometrie (EVLS) pri popise mechanizmu rozpúšťania práškového železa
1Po55	*T. Pálszegi, J. Rychlý, A. Búcsi*	Spatio-temporal patterns of electronic excitations in 2D ordered systems of chromophores
1Po56	*J. Víteček, J. Petrlová, J. Petřek, V. Adam, D. Potěšil, L. Havel, R. Mikelová, L. Trnková, R. Kizek*	Studium redukovaného, oxidovaného a nitroso glutathionu pomocí cyklické voltametrie
1Po57	*L. Přibylová, B. Dvořák*	GC-MS analýza plynných látek vznikajících při TPD pyridinu z povrchu měděného katalyzátoru se silikátovým nosičem
1Po58	*L. Rábara, M. Aranyosiová, P. Chandoga, I. Bugár, D. Velič, D. Chorvát*	Supramolekulové host-guest komplexy na báze cyklodextrín-difenylhexatrién
1Po59	*K. Reiffová, J. Podolonovičová, R. Nemcová, D. Škrabeková*	Analysis of prebiotics in samples from intestine
1Po60	*J. Rejnek*	Stanovení některých těžkých kovů v rostlinném materiálu metodou průtokové rozpouštěcí chronopotenciometrie
1Po61	*D. Remeteiová, E. Smončáková, D. Mackových, H. Šoltýsová*	Validation of THE FAAS method for the determination of Cd, Cu, PB, and Zn in extracts of the gravitation dust sediment fractionation analysis
1Po62	*R. Rozik, L. Zerzánková, L. Trnková*	Elektrodepozícia kovov na grafitovej elektróde študovaná pomocou eliminačnej voltametrie
1Po63	*S. Ružičková, J. Bajuszová, L. Koller, M. Matherny*	Optimization of the tandem method in the emission spectrometry
1Po64	*A. Sroka, J. Sakowicz, M. Barczak*	Investigation of the new physicochemical parameter in QSAR studies of antimycotic compounds

1Po65	*J. Seidlerová, M. Nováčková*	Stanovení molybdenu metodami atomové spektrometrie
1Po66	*V. Škeříková, P. Jandera, T. Hájek, L. Řehová, L. Baldriánová, M. Lasáková, G. Theodoridis, A. Tegai*	Analyses of natural antioxidants in breverages using RP-HPLC
1Po67	*P. Sklenovský, M. Otyepka, P. Hobza*	Výpočet interakčních energií α-šroubovic proteinového inhibitoru P18-Ink4C
1Po68	*L. Slavětínská, J. Mosinger, J. Sejbal*	Supramolecular secondary sources of singlet oxygen
1Po69	*V. Slovák*	Termogravimetrické studium nízkoteplotní oxidace uhlí
1Po70	*E. Smreková, I. Valent*	Počítačová rekonštrukcia konformácie chromozómov
1Po71	*R. Sokolová, E. Machníková, M. Hromadová, L. Pospíšil*	Electrochemistry of 3,5-dihalogeno-4-hydroxybenzonitriles (ioxynil and bromoxynil) in non-aqueous media
1Po72	*A. Sroka, J. Sakowicz, M. Barczak*	Thin-layer electrochromatography
1Po73	*V. Brezová, A. Staško, D. Dvoranová*	Antioxidant capacity of foods characterised by means of 1,1-diphenyl-2-picrylhydrazyl (DPPH)
1Po74	*H. Strnadová, L. Kvítek, T. Nevěčná*	Studium kritických micelárních koncentrací a jejich změn v závislosti na složení roztoku
1Po75	*M. Stupavská, M. Aranyosiová, D. Velič, D. Chorvát*	Vplyv fulerénu na matricový efekt v hmotnostnej spektrometrii sekundárnych iónov
1Po76	*O. Suchý, J. Marek, M. Novotná, J. Macák*	In-situ studium adsorpce inhibitoru Ramanovou spektroskopií
1Po77	*J. Swaczynová, E. Hauserová, L. Kohout, M. Strnad*	Využití imunoafinitní chromatografie pro stanovení brassinosteroidů v rostlinném materiálu
1Po78	*A. Synytsya, P. Konečná, J. Čopíková, P. Havlová*	VIS/NIR spektroskopická analýza ječmenů a sladů
1Po79	*J. Topinková, L. Trnková*	Studium acidobazických rovnováh oligonukleotidů pomocí spektrálních a chemometrických metod
1Po80	*J. Bdžoch, I. Bugár, D. Velič*	Vplyv povrchovej nábojovej hustoty montmorillonitových štruktúr na fluorescenčnú dynamiku kumarínu
1Po81	*J. Vojtěchovská, L. Kvítek, J. Lasovský*	Studium fázového rozhraní kapalina - vysokoenergetický povrch
1Po82	*V. Vojteková, D. Mackových*	Evaluation of the mobility of Hg in living environment
1Po83	*D. Briňarská, I. A. Amar, T. Gondová, K. Špacayová, V. Vojteková*	Analýza nových antidepresív v tabletách metódami LC
1Po84	*H. Zahradníčková, E. A. P. Bouman, B. Kalinová*	A novel approach in the study of compounds emitted by Ixodes ricinus (Acari:Ixodidae): the use of an artificial tick
1Po85	*T. Zelený, J. Hrbáč, Y. I. Tur`yan*	Electrochemical determination of cysteine using chemically modified carbon paste electrode
1Po86	*J. Zima, H. Dejmková, J. Barek*	HPLC stanovení aminoderivátů naftalenu pomocí uhlíkových pastových elektrod
1Po87	*J. Zita, M. Veselý, P. Dzik*	Preparation of new photocatalytic immobilized TiO_2 layer
1Po88	*J. Bdžoch, M. Žitňan, I. Bugár, V. Szöcs, T. Pálszegi, M. Janek, D. Chorvát, D. Velič*	Dynamika fluorescencie kumarínu v montmorillonitoch
1Po89	*I. Hoskovcová, J. Roháčová, J. Ludvík, D. Dvořák*	Vliv centrálního kovu, koordinační geometrie a typu ligandů na elektrochemickou oxidaci aminokarbenových komplexů chromu, wolframu a železa
1Po90	*A. Manová, S. Hlúbiková, E. Beinrohr, M. Střelec*	Determination of selenium by flow - through stripping coulometry
1Po91	*P. Tomčík, D. Bustin, M. Rievaj*	Interdigitated microelectrode arrays - new tool for pharmaceutical analysis
1Po92	*E. Klein, J. Rimarčík, V. Lukeš, J. Pigošová*	Applicability of PM3 and AM1 semi-empirical methods for the study of N-H and O-H bond dissociation enthalpies of primary antioxidants
1Po93	*A. Langauf, A. Laromaine, C. Viñas, F. Teixidor, H. Horáková, R. Vespalec*	Analýza meziproduktů homogenních stereoselektivních katalyzátorů na bázi klastrových sloučenin boru
1Po94	*L. Kvítek, R. Prucek, A. Panáček, R. Novotný*	Možnosti přípravy koloidních částic stříbra chemickou redukcí stříbrné soli
1Po95	*P. Zuman*	Některé příklady použití polarografie a voltametrie v analyse organických látek

Sekcia 2 - Anorganická a materiálová chémia

2Po01	*L. Andrezálová, Z. Ďuračková, H. Gbelcová, S. Jantová*	Interakcia oxo-peroxokomplexu vanádu(V) s DNA
2Po02	*M. Ambrová, P. Fellner*	Electrochemical reactions od sulphur in chloride and fluoride melts
2Po03	*M. Bakardiev, J. Holub, D. Hnyk, I. Císařová, M.G.S. Londesborough, D.P. Perekalin, B. Štíbr*	A unique example of „absolute Tautomerism“ in the zwitterionic 7-RR'NH-*nido*-$C_3B_8H_{10}$ tricarbollide series
2Po04	*J. Bareš, A. Růžička, M. Nádvorník, P. Meunier*	Pokusy o přípravu heterobimetalických sloučenín s vazbou kovů 4. a 14. skupiny PS
2Po05	*L. Bartoňová, Z. Klika*	Sekvenční extrakce uhlí a nedopalu z elektráren s cirkulující fluidní vrstvou
2Po06	*L. Bartoňová, Z. Klika*	Sekvenční extrakce uhlí a nedopalu z malých spalovacích jednotek
2Po07	*P. Brázda, D. Nižňanský, P. Drahota, S. Bakardijeva V. Tyrpekl, J. Vejpravová*	Příprava nanokompozitů ε-Fe_2O_3/SiO_2 z molekulárního prekurzoru metodou sol- gel
2Po08	*V. Brožek, M. Eliáš, J. Janča*	Redukce wolframanových prekurzorů v plazmatu buzeném ve smesi vodíku a vhodného uhlovodíku
2Po09	*M. Drábik, D. Tunega, S. Balkovic, V.Š. Fajnor*	Počítačová simulácia vodíkových väzieb pre lepšie pochopenie údajov termickej analýzy taumazitu
2Po10	*I. Popa, L. Dvořák, J. Mikulík, Z. Trávniček*	Biologicky aktivní Fe(III) komplexy s cytokininovými deriváty
2Po11	*M. Erben, J. Merna, M. Dušek*	Příprava, struktúra a katalytická aktivita halogenosilyl (cyklopentadienyl) titaničitých komplexů
2Po12	*A. Fišerová, M. Vlček, H. Jain*	Selektívni leptání chalkogenidových vrstev a jeho praktické aplikace
2Po13	*P. Fitl, V. Myslík, M. Vrňata, V. Komenda, R. Fryčer*	Impedance properties of tin dioxide-tin acetylacetonate thin films
2Po14	*K. Fojtlová, J. Taraba*	Nové deriváty lineárních fosfazenů obsahujících skeletarní strukturu S-N=P-N(H)-Si, příprava a charakterizace
2Po15	*V. Frank, J. Havlica*	Morfologie ettringitu
2Po16	*J. Grym, O. Procházková, F. Šrobár*	Influence of earth admixtures on growth rate of InP layers
2Po17	*M. Hamerníková, K. Klimánková, O. Koubská, A. Marešková, V. Košíková*	Extrakce 6-sulfatoxymelatoninu na pevné fázy
2Po18	*M. Holecová, A. Panáček, T. Nevěčná, L. Kvítek*	Štúdium koloidných roztokov striebra
2Po19	*J. Holub, M. Bakardjiev, B. Štíbr*	Carbaborane chemistry the preparation of some halogen derivatives of nido-DI- and tricarbaboranes
2Po20	*J. Honzíček, I. Krutišová, I. Císařová, J. Vinklárek*	Synthesis of ring-substituted vanadocene(IV) complexes
2Po21	*L. Hora, P. Wagner, F. Škvára*	Výskum a vývoj technológie alfa modifikácie hemihydrátu síranu vápenatého
2Po22	*H. Hradecká, Z. Guschlová, A. Helebrant*	Vliv přídavku La_2O_3 na chemickou odolnost skel určených pro dentální aplikace
2Po23	*M. Hubičková, P. Novotný, P. Sajdl*	Štěrbinová koroze v podmínkach PWR parogenerátorů
2Po24	*J. Chrappová, P. Schwendt*	Termické vlastnosti fluoroperoxokomplexov $Cs_3[V_2O_3(O_2)_3F_3].3H_2O$ a $Cs_3[V_2O_2(O_2)_4F_3].H_2O$
2Po25	*M. Chromá*	Vliv relativní vlhkosti na průběh karbonatace betonu
2Po26	*R. Ivaniková, I. Svobodová, A. Mašlejová, B. Papánková, H. Fuess*	Hydrogen bridges in crystall engineering
2Po27	*V. Jakeš, D. Sýkorová, O. Smrčková*	Příprava supravodiče Bi-2223 s částečnou substitucí kyslíku fluorem
2Po28	*J. Jašková, P. Segľa, D. Mikloš, M.J. Korabik, J. Mrozinski, R. Sillanpää, M. Melník*	Crystal structure, spectral and magnetic properties of cobalt(III) pyridinecarboxylates
2Po29	*M. Javůrek, P. Šulcová, M. Trojan*	Optimalizace podmínek přípravy pigmentů
2Po30	*J. Jirák, L. Koudelka, P. Mošner*	Příprava a charakterizace skel systému $ZnO-Sb_2O_3-P_2O_5$
2Po31	*J. Jurišová, P. Fellner, V. Khandl*	Preparation of $Mg(OH)_2$ and $CaCO_3$ from dolomite
2Po32	*A. Klanicová, Z. Trávniček, I. Popa, V. Kryštof*	Příprava, studium a cytotoxická aktivita dvojjaderných Cu(II) komplexů s deriváty adeninu
2Po33	*J. Klimentová, P. Vojtíšek*	New anion receptors based on calix[4]arenese
2Po34	*I. Koutnik, P. Ševčík*	Preparace huminových kyselin z jihomoravských lignitů
2Po35	*M. Krbal, T. Wágner, J. Jedelský, M. Vlček, B. Frumarová, M. Frumar*	Studium amorfních tenkých vrstev $Ag_x(As_{0.40}S_{0.60})_{100-x}$ připravených pulsní laserovou depozicí (PLD) a měření kinetiky difúze stříbra v PLD vrstvě $As_{40}S_{60}$

2Po36	*A. Kurečka, J. Kameníček, P. Kopel, Z. Šindelář*	Komplexy niklu a mědi s benzentrikarboxylovou kyselinou, vybranými N-donorovými ligandmi a Schiffovými bázemi
2Po37	*M. Kvíčalová, P. Selucký, I. Císařová, B. Grűner*	New extracting agents based on [(1,2-$C_2B_9H_{11}$)2-3,3'-Co]- ion
2Po38	*M. Lhotka, I. Sedlářová*	Strukturální charakteristika porozity materiálu na bázi uhlíku
2Po39	*J. Luxová, P. Šulcová, M. Trojan*	Fyzikálně-chemické vlastnosti sloučenín typu Sr_2CeO_4
2Po40	*Z. Macháčková, I. Nemec, K. Teubner, P. Němec, P. Vaněk*	Dusičnan difenylguanidinia(1+) - studium vibračních spekter, krystalové struktúry a nelineárních optických vlastností
2Po41	*E. Májová, V. Jakeš, O. Smrčková, D. Sýkorová*	Vliv velkosti částic CuO na vlastnosti supravodivé fáze Bi-2223
2Po42	*J. Martincová, R. Jambor*	Reakce triorganociničitých Y, C, Y -chelátů
2Po43	*M. Matuchová, K. Zdánsky, J. Zavadil*	Study of the properties of lead iodide for X-ray detection
2Po44	*I. Matulková, I. Němec, K. Teubner, P. Němec, Z. Mička*	Studium hydrogenoxalátu 4-amino-1,2,4-triazolinia(1+)
2Po45	*K. Melánová, L. Beneš, V. Zima, J. Svoboda*	Interkaláty fosforečnanu vanadylu s estery
2Po46	*Z. Moravec, M. Nečas, J. Pinkas*	Studium substitučních a kondenzačních reakcií organohlinitých sloučenin
2Po47	*I. Němec, Z. Macháčková, R. Gyepes, Z. Mička*	Vibrační spektroskopie solí aminoguanidinu s kyselinou dusičnou
2Po48	*J. Ondráčková, P. Třešňáková, J. Špirková*	Návrh a syntéza komplexních sloučenín erbia pro přípravu aktivních optických vlnovodů
2Po49	*P. Třešňáková, J. Špirková, J. Ondráčková*	Dotace erbia do porézních silikátových skel pro použití ve fotonických strukturách
2Po50	*Z. Padělková, A. Růžička*	Studium syntézy organocínaté sloučeniny obsahující C,N-chelátující ligand
2Po51	*H. Paláčková, P. Schneiderová, J. Vinklárek, B. Frumarová*	An interaction of antitumor active vanadocene dichloride with sulphur containing amino acids
2Po52	*A. Panáček, L. Kvítek, M. Kolář, N. Pizúrová, T. Nevěčná*	Řízená příprava a antimikrobiální aktivita koloidních částic stříbra
2Po53	*J. Petrů, O. Prokeš, P. Sajdl*	Vliv nízkých koncentrací kyslíku na korozní procesy v plynovodech a na účinnost inhibitorů
2Po54	*M. Picka, M. Erben, J. Vinklárek*	Příprava a charakterizace ANSA-metallocenů $Me_2E(C_2H_4)_2MX_2$
2Po55	*L. Piknová, K. Győryová, J. Chomič, D. Hudecová, D. Múdroňová, V. Zeleňák, Z. Vargová*	Príprava, vlastnosti a biologická aktivita aromatických karboxylátov zinku
2Po56	*J. Pospíšil, L. Koudelka, P. Mošner*	Příprava a charakterizace niobáto-draselných borofosfátových skel
2Po57	*O. Procházková, J. Grym, J. Zavadil, K. Žďánský, M. Kopecká*	Impact of rare earth elements on the properties of InP-based epitaxial layers
2Po58	*J. Příhoda, M. Beran*	Syntéza a vlastnosti bis(fluorosulfurilových)imidů alkalických kovů
2Po59	*V. Reichlová, P. Ostřížek, J. Pinkas*	Sonochemická příprava
2Po60	*L. Richtera, A. Pokluda, A. F. Afonso, Z. Žák, J. Taraba, J. Toužin*	Reakce oxidu selénu s pyridinem a pyridin-N-oxidem
2Po61	*D. Rohanová, R. Horváthová, M. Maryška, A. Helebrant*	Charakter povrchu titánovej zliatiny (Ti6A14V) vykazujúcej bioaktívne chovanie
2Po62	*T. Rojka, F. Kovanda, V. Machovič, T. Grygar*	Charakterizace směsných oxidů Co a Mn připravených tepelným rozkladem sloučenín typu hydrotalcitu
2Po63	*P. Rovnaník, Á. Dufka, J. Novák*	Studium hydratace alkalicky aktivované strusky
2Po64	*E. Rudinská, E. Jóna, M. Sapietová, V. Jorík*	Príprava a vlastnosti interkalačných zlúčenín montmorillonitov pripravených reakciou tuhá fáza - plyn
2Po65	*G. Rudinská, D. Ondrušová, M. Liška, P. Šimon*	Stanovenie c_p vysokoolovnatej vsádzky a štúdium jej predohrevu odpadným teplom spalín
2Po66	*M. Sapietová, V. Luptáková, E. Jóna, E. Rudinská*	Štúdium interakcie Fe(III) a Ni(II) formy montmorillonitu s benzimidazolom v celom rozsahu pH
2Po67	*I. Seitlová, J. Taraba, Z. Žák*	Studium reakcí sylilderivátů lineárních fosfazenů s halogenidy kovů i nekovů, příprava heterocyklů fosfazenového typu, studium jejich reaktivity a struktury
2Po68	*E. Scholtzová*	AB INITIO study of structural changes in lizardite-1T: $\{Si^{4+}/Al^{3+}\}$, $\{Si^{4+}/Fe^{3+}\}$, $[Mg^{2+}/Al^{3+}]$, $[Mg^{2+}/Fe^{3+}]$ substitution
2Po69	*P. Slepička, V. Švorčík*	Modifikace polymeru laserovým zářením
2Po70	*Z. Spíchal, M. Nečas*	Koordinační sloučeniny lanthanoidů s bidentátními P-C-P ligandy
2Po71	*J. Svoboda, V. Zima, K. Melánová, L. Beneš*	Nové arylfosfonáty kovů alkalických zemin

2Po72	*P. Ševčík, I. Koutník*	Možnosti využití karbochemických surovin pro přípravu uhlíkových membrán
2Po73	*R. Ševčík, J. Příhoda*	Nové dusíkofosforečné heterocykly
2Po74	*V. Šugárková, P. Baran, E. Plevová*	Termická polykondenzace směsí karbochemických komponent
2Po75	*J. Hrabica, P. Šulcová, M. Trojan*	Červené perowskitové pigmenty pro keramický průmysl
2Po76	*M. Tůma, P. Šulcová, M. Trojan*	Příprava sloučenín typu $Al_{2-(x+y)}La_xM_yO_3$
2Po77	*V. Šourek, J. Bareš, A. Růžička*	Studium struktury a vlastností komplexní a organokovové sloučeniny Pb(II)
2Po78	*P. Švec, M. Nádvorník, P. Novák, A. Růžička*	Studium organociničitých sloučenín obsahujících C,N-chelátující ligand jako fluoračních činidel pro fluorace chlorosilanů
2Po79	*L. Vaculíková, E. Plevová*	Vliv meřících technik a velikosti částic na charakter infračervených spekter jílových minerálů
2Po80	*Z. Voráč, M. Alberti, P. Urbančík, J. Janča*	Reakce $(NPF_2)_3$ v kapacitně vázaném plazmatu
2Po81	*R. Voznicová, L. Rakovická, P. Vidláková, M. Alberti, J. Příhoda*	Příprava nových derivatů fosfazenů - reakce diamidotetrachloro -*cyklo*-trifosfazénu s aminoderiváty adamantanu
2Po82	*J. Voženílková, P. Šulcová*	Pigmenty typu $Bi_{1,3-x}Y_xZr_{0,525}O_3$
2Po83	*M. Vyšvařil, D. Dastych*	Příprava 3,3,4,4,-tetramethylsukcinimidoderivátů fenylchlorfosfanů a fenylchlorfosforanů
2Po84	*S. Podsiadlo, M. Kaminski, P. Wieczorek, P. Žuk*	Reaserching of an optimum method of synthesis monocrystals of galium nitride (GaN)
2Po85	*M. Zlámal, J. Krýsa*	Fotokatalytické a elektrochemické vlastnosti vrstev oxidu titaničitého
2Po86	*P. Žák, J. Taraba, M. Černík*	Reakce halogenidů fosforitých s N-donorovými Lewisovými bázemi
2Po87	*F. Šoukal, J. Havlica*	Puzzolanic activity of secondary raw materials

Sekcia 3 - Organická chémia a polyméry

3Po01	*H. Bělohlavová, J. Přikryl, M. Černý, V. Macháček, A. Lyčka*	Studium struktury produktů azokopulace 5-nitro-2,1-benzisothiazol -3-diazonium hydrogensulfátu s aromatickými aminy
3Po02	*S. Kováčová, M. Lácová, Š. Štanga, A. Boháč, M. Sališová, G. Addová*	Syntéza derivátov kyselín 2-(2-oxo-2H-chromén-3-yl)octových - prekurzorov nových antineoplastík
3Po03	*D. Chromcová, J. Brožek, J. Roda, J. Náhlík, V. Šašek*	Degradace polyesteramidů na bázi ε-kaprolaktamu a ε-kaprolaktonu
3Po04	*P. Cankař, M. Maloň, P. Barták, J. Slouka*	Jednoznačná syntéza n-fenyl-3-aminopyrazolů
3Po05	*P. Capek, V. Hříbalová, M. Matulová*	Pectin and hemicellulose polysaccharides of sage possessing immunomodulatory activity
3Po06	*R. Cibulka, B. Plancq, L. Marková*	Flavin based oxidation catalysts
3Po07	*M. Černý, J. Přikryl*	Homologická směsná disperzní barviva pro barvení polyesterových vláken
3Po08	*P. Čonka, J. Gonda*	Stereoselective synthesis sugar moiety of miharamycins and their analogues via [3,3]-heterosigmatropic rearrangements
3Po09	*M. Danko, Š. Chmela, P. Hrdlovič*	Príprava, fotochemická stabilita a využitie dvojfunkčných fluorescenčných značiek benzotioxantén-HAS
3Po10	*M. Doležal, R. Bruner, V. Buchta, J. Jampílek, K. Kráľová*	Amidy pyrazinkarboxylové kyseliny: syntéza, antifungální hodnocení a jejich inhibiční vliv na fotosyntézu
3Po11	*P. Dzik, M. Veselý, I. Králová*	UV curable methacrylated PVAL: modification via esterification
3Po12	*A. Ďuračková, H. Valentová, M. Dušková-Smrčková, K. Dušek*	Depandence of cyclization and mechanical properties on diluent in polyurethane network formation
3Po13	*V. Fajt, L. Kurc, L. Červený*	Vliv složení rozpouštědlového systému na kinetiku oxidace 2-ethyl-5,6,7,8-tetrahydro-9,10- anthrahydrochinonu
3Po14	*P. Farkaš, S. Bystrický*	Preparation of glucan derivatives with masked aldehyde group for further conjugation
3Po15	*A. Fiedlerová, Š. Chmela, E. Borsig, A. Kleinová*	Foto- a termooxidácia kompozitov na báze iPP a sPP
3Po16	*Ľ. Floch, I. Šurina*	Preparation of isothiocyanates modulating cell cycle and introduction of apoptosis in different types of cancer cell
3Po17	*Š. Florián, I. Novák, M. Šivová*	Silver-based electro-conductive pressure-sensitive adhesives
3Po18	*M. Giurg, K. Piekielska, E. Wiech, M. Gębala, B. Ditkowski, M. Wolański, W. Peczyńska-Czoch, J. Młochowski*	New approach to oxidative cyclocondensation of 2-aminophenol to 2-amino-3H-phenoxazin-3-one
3Po19	*V. Langer, M. Koóš, D. Gyepesová, M. Sládkovičová, J. Lustoň, J. Kronek*	Kryštálová štruktúra 2-(2'-hydroxyfenyl)-2-oxazolínu, 2-(3'-hydroxyfenyl)-2-oxazolínu a 2-(4'-hydroxyfenyl)-2-oxazolínu

3Po20	*F. Hampl, M. Křováček, R. Cibulka, F. Liška*	Průběh hydrolýzy organofosfátů katalyzované amfifilními pyridiniovými aldoximy
3Po21	*A. Hrabálek, T. Holas, K. Vávrová, J. Klimentová*	Termotropní chování amoniových solí karbamových kyselin
3Po22	*J. Hrbáček, R. Pavlica, A. Blaha, K. Šimůnková*	Porovnání na základě dvou typů epoxidových pryskyřic vyhodnocení centrálně složeného rotačního experimentu
3Po23	*Ľ. Hrčková, Š. Chmela, I. Lacík*	Charakterizácia polystyrénov, pripravených iniciáciou nitroxylovými radikálmi v bloku, GPC chromatografiou a UV spektroskopiou
3Po24	*M. Chytil, M. Pekař*	Study of viscometric and aggregation behavior of hyaluronic derivatives
3Po25	*A. Imramovský, J. Vinšová, J. Kuneš*	Neočekávané cyklizace při přípravě esterů α-aminokyselin se salicylanilidy
3Po26	*I. Janigová, F. Lednický, I. Chodák*	Štúdium nanokompozitov na báze montmorillonitu s biodegradovateľnou matricou
3Po27	*D. Jun, J. Tomanová, K. Kuča, V. Opletalová*	Stanovení aktivity cholinesteráz v krvi za použití 2,2'-dithiopyridinu
3Po28	*J. Myšák, R. Kalousková, L. Mastný, Z. Šrank, J. Šimek*	Vliv TiO_2 na stabilitu neměkčených směsí PVC
3Po29	*R. Keder, P. Drabina, J. Hanusek, M. Sedlák*	Henryho reakce: nové měďnaté komplexy na bázi mono a bis(imidazolyl) pyridinů
3Po30	*J. Kočí, L. Zahajská, J. Kaustová, V. Klimešová*	Heterocyklická analoga benzylsulfanylderivátů benzazolů
3Po31	*K. Kopecký, P. Zimčík, Z. Musil, M. Miletín*	Deriváty asymetrických azaftalocyaninů jako „Dark quenchery“
3Po32	*I. Králová, M. Veselý, P. Dzik*	The comparing properties of photoreactive modified PVAL used in inkjet printing
3Po33	*J. Kredatusová, J. Brožek, J. Roda*	Příprava nanokompozitů exfoliovanou adsorpcí
3Po34	*J. Kronek, J. Rychlý, K. Csomorová, A. Kleinová, S. Kirschnerová, K. Vizárová, M. Vrška*	Vplyv chemickej modifikácie papiera na mechanické vlastnosti a termoxidačnú stabilitu
3Po35	*L. Kubicová, M. Šustr, K. Kráľová*	5-methylthiosalicylanilidy - inhibitory Hillovy reakce
3Po36	*K. Kuča, D. Jun, K. Musílek, J. Cabal, M. Hrabinová*	Nové reaktivátory acetylcholinesterázy inhibované tabunem
3Po37	*J. Kučka, M. Hrubý, J. Kozempel, O. Lebeda, K. Ulbrich*	Termoresponsivní polymery jako perspektivní nosiče radionuklidů pro lokální radioterapii
3Po38	*S. Kukla, D. Výprachtický, V. Cimrová*	Luminiscence komplexů lanthanoidů s polymery obsahujícími chinolinonový fluorofor
3Po39	*J. Kvíčala, M. Skalický, P. Macháček*	DFT výpočty J_{FF} interakčních konstant fluoralkenylových organokovů
3Po40	*V. Lišková, T. A. M. D. Pinto, L. Burgert, R. Hrdina*	Nová reaktivní barviva pro polyamid
3Po41	*D. Loníček, F. Langmaier*	Proteinický odpad z výroby usní, snadná isolace polypeptidů z koželužských luhů
3Po42	*J. Lustoň, J. Kronek*	Azobenzenes containing 4,5-dihydrooxazole group. Polymerization and photochemistry
3Po43	*M. Macháček, L. Kubicová, M. Šustr, J. Kaustová*	Atimykobakteriální 5-bromthiosalicylanilidy
3Po44	*M. Mandel*	Syntéza N-methylovaných oligopeptidů $(^{13}C_1,^{15}N\text{-THR})_N$ násobnou Ugiho čtyřkomponentní kondenzací
3Po45	*J. Hájíček, M. Buděšínský, Z. Mandelová*	19α-hydroxyschizogalin: nový typ schizozyganových alkaloidu ze *Schizozygia caffaeoides* (Boj.) Baill
3Po46	*V. Mazíková, I. Sroková, D. Mošková, A. Ebringerová, V. Sasinková*	Properties of carboxymethylstarch ester and its blends with polyethylene
3Po47	*J. Mičová, B. Steiner, M. Koóš, V. Langer, D. Gyepesová*	Synthesis and structure determination of some glycoconjugates related to mannojirimycin and serine
3Po48	*M. Mičušík, M. Omastová, J. Prokeš, K. Csomorová, I. Krupa*	Mechanické a elektrické vlastnosti kompozitov na báze termoplastických matríc a vodivých celulózových vlákien
3Po49	*V. Milata, J. Štetinová, N. Prónayová, J. Leško, O. Petrov*	Synthesis and properties of some 1,2,4-trisubstituted pyrroles
3Po50	*J. Mísařová, L. Svoboda, L. Prokůpek, M. Večeřa, J. Šňupárek*	Botnání funkcionalizovaných mikrogelů na bázi kopolymerů methylmethakrylátu a butylmethakrylátu v alifatických ketonech

3Po51	*P. Mokrý, E. Kujová, M. Havlů, L. Bartošová, K. Horká, A. Kovařík, J. Csöllei*	Syntéza a biologická aktivita enantiomerů arylkarbonyloxyaminopropanolů
3Po52	*D. Mošková, A. S. Luyt, I. Chodák*	Nanokompozity na báze biodegradovateľnej polymérnej matrice
3Po53	*M. Mravčáková, M. Omastová, J. Pionteck, P. Pötschke, B. Pukánszky*	Štruktúra a vodivosť polypropylén/montmorilonit/polypyrolových nanokompozitov
3Po54	*F. Mravec, J. Běťák, M. Pekař*	Peylene as alternative probe in aggregation studies of hydrophobized hyaluronates
3Po55	*K. Musilek, K. Kuča, D. Jun, Y. S. Jung, T.H. Kim, V. Dohnal, M. Dolezal*	Synthesis of three bispyridinium compounds bearing 3-oxapentane linker and evaluation of their reactivation activity against chlorpyrifos and methylchlorpyrifos-inhibited acetylcholinesterase
3Po56	*T. Nedelčev, J. Rychlý, K. Csomorová, I. Krupa*	Príprava, vlastnosti a stabilizačná účinnosť silánového stabilizátora obsahujúceho 2,6-di-*tert*-butyl-4-metylfenolovú štruktúrnu jednotku
3Po57	*N. T. T. Huong, R. Kuželka, P. Drašar*	Selektivní oxidace kyseliny cholové: srovnání reakčních podmínek pomocí ^{1}H-NMR spekter
3Po58	*Z. Nógellová, I. Janigová, I. Chodák*	Vplyv zosietenia na vlastnosti polyetylénu a polykaprolaktónu
3Po59	*I. Novák, M. Števiar, I. Chodák*	Surface properties of polyethylene terephthalate modified by electric discharge plasma
3Po60	*I. Obadalová, J. Hájíček*	Synthesis of latanoprost diastereoisomers
3Po61	*T. K. Olszewski, P. Coutrot, S. Claudel, P. Mutzenardt, C. Grison, B. Boduszek*	First total synthesis of potassium aeshynomate and its not natural stereoisomers
3Po62	*M. Omastová, K. Boukerma, P. Fedorko, M. M. Chehimi, M. Trchová*	Príprava a vlastnosti polypyrolu obsahujúceho bis(2-etylhexyl) sulfosukcinát
3Po63	*D. Ondrušová, M. Pajtášová, E. Jóna, G. Rudinská, M. Koman, P. Šuri*	Štruktúrna charakteristika ditiokarbamátov kovov a ich vplyv na vlastnosti gumárenských zmesí
3Po64	*M. Pajtášová, D. Ondrušová, E. Jóna, M. Koman, V. Jorík*	Štúdium štruktúrnych a spektrálnych vlastností karboxylátomeďnatých komplexov s benztiazolom
3Po65	*K. Palát, G. Braunerová, M. Miletín, V. Buchta*	Substituted pyridylguanidines. Synthesis and antifungal activity
3Po66	*J. Palus, M. Chojnacka, K. Kloc, A. Kumka, I. Mossakowska, G. Wójcik, J. Młochowski*	Endocyclic seleninamides a new class of stable chiral selenium compounds
3Po67	*P. Pařík, M. Mansfeld, M. Ludwig*	Syntéza 2-fenyl-4-(subst.aminomethyl)-1H-imidazolů
3Po68	*P. Pavlačková, V. Cimrová, D. Výprachtický*	Poly[(9,9-dihexadecylfluorene-2,7-diyl)-1,4-phenylene] as new polymer material for photonic devices
3Po69	*M. Pešková, P. Šimůnek, V. Bertolasi, A. Lyčka, V. Macháček*	Preparation and study of the structure of 5-aryldiazenyl-2,1,3 -boroxazines
3Po70	*T. Pilarčík, J. Hájíček*	Towards schizozygine: synthesis of advanced intermediates
3Po71	*M. Pleteníková, L.Matisová-Rychlá, J. Rychlý*	Vplyv morfologických vlastností škrobu na termooxidačnú stabilitu študovanú chemiluminiscenciou
3Po72	*E. Plevová, V. Šugárková, L. Vaculíková*	Effect of chlorides in coal charges on resultant coal tar mesophase properties
3Po73	*J. Kovářová, J. Podešva*	Modification and thermal behaviour of liquid polybutadienes
3Po74	*M. Pravda, L. Kubicová, M. Sedlák*	Syntéza a charakterizace nových konjugátů poly(ethylenglykolu) s deriváty salicylanilidu
3Po75	*V. Šašek, I. Prokopová, J. Vitásek, J. Náhlík*	Biologická degradace aromaticko-alifatických kopolyesterů
3Po76	*K. Radwan-Pytlewska, C. Palomo, J. M. Aizpurua, I. Ganboa, A. Benito, M. M. Fratila, A. Jimenez, J. I. Iranda, A. Micle, A. Linden*	Synthesis of type-II β -turn surrogate dipeptides based on syn α-amino-α,β- dialkyl-β-lactams
3Po77	*R. Rödling, A. Jandera, V. Panajotová, M. Kverka, M. Kuchař*	Antileukotrienika s bifenylovým fragmentem v léčbě ulcerativní kolitidy
3Po78	*M. Rozsypalová, M. Potáček*	Syntéza reaktivátorů a inhibitorů acetylcholinesterázy vycházející z 7- methoxytakrinu
3Po79	*V. Sasinková, I. Sroková, Z. Hromádková, A. Ebringerová*	Application of FT-IR spectroscopy in analysis of polysacharide fatty acid esters
3Po80	*B. Gáspár, D. Žatko, V. Semak, A. Bílešová, I. Duchéne, M. Sališová, A. Boháč*	Príprava a reaktivita derivátov 2-hydroxytetral-1-ónu
3Po81	*P. Skála, L. Kubicová, M. Pravda, V. Buchta, M. Macháček*	Syntéza a antifungální aktivita dihydroxybenzanilidů

3Po82	*I. Skotnicová, F. Potůček*	Washing of pulp fibres with aqueous solutions of anionic surfactants
3Po83	*M. Slavíková, J. Hájíček*	Nová syntéza tamsulosinu a příprava nečistot
3Po84	*M. Soural, J. Hlaváč, P. Hradil, M. Hajdůch*	Syntéza a cytotoxické účinky vícejaderných derivátů 3-hydroxy-4(1H)chinolonu
3Po85	*J. Stýskal, L. Stýskalová, J. Slouka*	Syntéza některých derivátů 1,2,4-triazino [4,5-a]benzimidazol-1-onu
3Po86	*L. Svoboda, J. Mísařová, L. Prokůpek, J. Šňupárek*	Studium mechanických vlastností epoxidových pryskyřic modifikovaných funkcionalizovanými akrylátovými kopolymery
3Po87	*E. Svobodová, R. Cibulka, F. Hampl, F. Liška*	Nové jednoduché ligandy pro extrakci iontů přechodných kovů
3Po88	*I. Šeděnková, M. Trchová, E. N. Konyushenko, J. Stejskal*	The influence of acidity on the polyaniline film formation
3Po89	*S. Šenauerová, P. Pařík, M. Ludwig*	Syntéza {2-[subst.(hydroxy)methyl]fenyl}-1H-imidazolů
3Po90	*A. Šilhánková, F. Kielar, M. Chvapil, F. Liška*	Funkční deriváty D-penicillaminu jako inhibitory nádorového růstu
3Po91	*J. Šimek, V. Dočkalová, R. Kalousková*	Kompatibilizace směsí PVC / PA12
3Po92	*M. Šoteková, M. Martinková, J. Gonda, C. O. Kappe*	Mikrovlnami akcelerované aza-Claisenove prešmyky alyltiokyanátov a alylazidov odvodených od uridínu
3Po93	*K. Špirková, Š. Stankovský, S. Jantová, R. Ovádeková*	Synthesis and cytoxic activity of new substituted[1,2,4]triazolo [4,3-*c*]quinazolines
3Po94	*Ľ. Černáková, M. Mikulášová, K. Štechová, D. Klimová, I. Hudec*	Polypropylénové netkané textílie s antimikrobiálnymi vlastnosťami
3Po95	*K. Štechová, L. Černáková, V. Chrástová, K. Mikušová, D. Bakoš, M. Černák*	Surface modification of lignocellulosics
3Po96	*H. Štěpánková, J. Hájíček, H. Petříčková, L. Tisovská*	Charakterizace a vlastnosti polymorfních forem klopidogrelu hydrobromidu
3Po97	*M. Števiar, I. Novák, I. Chodák*	Study of adhesive properties of polyethylene modified by barrier and RF - discharge plasma
3Po98	*M. Vala, M Weiter, K. Černá, S. Nešpůrek, O. Zmeškal*	Organic semiconductors influenced by photochromic transformation of spiropyran dye
3Po99	*P. Velíšek, J. Hájíček*	Nečistoty při výrobě oxykodonu
3Po100	*R. Vícha, V. Ježková, A. Zierhut*	Synthesis and properties of new adamantane-containing nitro compounds
3Po101	*J. Vinšová, Z. Oktábec*	Otevřené formy antituberkuloticky aktivních benzoxazolů
3Po102	*J. Vitásek, I. Prokopová, M. Koudela*	Chemická modifikace odpadního polyethylentereftalátu
3Po103	*H. Wójtowicz, M. Piętka, K. Chodak, P. Kula, W. Peczyńska, E. Piasecki, J. Młochowski*	New organoselenium biological response modifiers active against pathogenic viruses, bacteria and fungi
3Po104	*L. Wolfová*	Study of coatings dissolution and solubility parameters
3Po105	*A. Zádrošová, J. Gonda*	Stereoselektívne syntézy analógov Polyoxinu C
3Po106	*B. Zachová, R. Horák, A. Blaha, P. Hlaváček*	Tepelná vodivost svrškových obuvnických materiálů
3Po107	*H. Zachová, S. Man, J. Taraba, M. Potáček*	Přesmyk criss-cross cykloaduktů pomocí elektrofilních činidel
3Po108	*P. Zimčík, M. Kostka, M. Miletín, Z. Musil, K. Kopecký*	Agregační rozdíly mezi ftalocyaniny a jejich azaanalogy
3Po109	*D. Žatko, D. A. Lanfranchi, G. Hanquet*	Large scale and convergent preparation of (-)-*R*-Wieland-Miescher diketone analogue starting from propionyl chloride and diethyl malonate
3Po110	*J. Adamec, R. Beckert, D. Weiß, V. Klimešová, U. Möllmann, J. Kaustová, V. Buchta, K. Waisser*	ω-Pyridiniumheptylethery estrogenů a jejich benzylsulfanyl deriváty: nové sloučeniny s potenciální antibakteriální, antimykotickou a antiproliferativní aktivitou
3Po111	*G. Addová, H. Jurdáková, R. Kubinec, Ž. Frčková, J. Blaško, A. Kraus, L. Soják, A. Boháč*	Identification of all 93 isomeric acyclic octenes in fluid catalytic cracked gasoline

Sekcia 4 - Vyučovanie a história chémie

4Po01	*M. Pekař, M. Klučáková*	Prof. Baborovský - 130. výročí narození
4Po02	*H. Matějková, V. Čížková, H. Čtrnáctová*	Chemické složení a buněčná stavba organizmů - učební úlohy
4Po03	*P. Opatrný, M. Bílek*	Školní experimenty s modely palivových článků
4Po04	*K. Myška, K. Kolář, M. Marek*	Vizualizace řešení vybraných úloh z chemie pomocí molekulárních modelů
4Po05	*V. Řezáčová*	Středoškolský a vysokoškolský systém výuky chemie očima studentů

4Po06	*J. Šulcová, A. Plško, P. Janypka, Z. Golitková*	New forms and methods education in the region rubber technology (E-learning)
4Po07	*L. Kukľová*	Ďalšie vzdelávanie učiteľov chémie dištančnou formou - meranie efektivity
4Po08	*M. Klečková et al.*	Chemická laboratoř na náměstí - Jarmark 2005
4Po09	*V. Š. Fajnor, J. Chrappová*	Vedomosti z chémie reprodukovať alebo tvorivo využívať?
4Po10	*M. Vasileská*	Spolupráce centra pro zjišťování výsledků vzdeláváni s VŠ v oblasti evaluace a vzdělávaní učitelů chemie
4Po11	*Z. Vajcíková, P. Gálusová, K. Cejpek*	Projektové vyučovanie v edukačnom procese chémie
4Po12	*Z. Vajcíková, Z. Višňovcová*	Vývojové trendy vedného odboru didaktika chémie na Slovensku

Sekcia 5 - Životné prostredie, potravinárstvo a biotechnológia

5Po01	*M. Adam, A. Delijannisová, A. Eisner, K. Ventura, J.Královský*	Využití mikroextrakce tuhou fází pro stanovení silic v bylinách
5Po02	*B. Antošová, J. Kozler, J. Novák, J. Kubíček, D. Horová, I.Vondrová*	Biologická aktivita huminových látek
5Po03	*J. Augustín, D. Hudecová, J. Hojerová*	Antimicrobial activity of tea leaves (Cammelia sinensis L.) and their hot water extracts
5Po04	*T. Bajer, Z. Zdráhalová, M. Adam, S. Řezková, K. Ventura*	Metody extrakce isoflavonoidů z rostlin
5Po05	*W. Baran, W. Wardas, A. Makowski*	Photocatalytic degradation of azo dyes in the presence of TiO_2 aqueous suspension
5Po06	*W. Baran, W. Wardas, A. Makowski*	The influence of chemical nature and absorbance of solutions on photodegradation of dyes in the presence of TiO_2
5Po07	*W. Baran, J. Sochacka, W. Wardas*	Toxicity and biodegradability of sulfonamides and products of their photocatalytic degradation in aquatic solutions
5Po08	*P. Blafková, A. Synytsya, J. Čopíková, M. Uher*	Vázání kojové kyseliny na chitosan
5Po09	*T. Bojňanská, Z. Muchová*	Nutritional and cooking quality of wheat bran enriched pasta
5Po10	*L. Brindzová, P. Rapta, M. Takácsová*	Antioxidačná aktivita slovenských odrôd ovsa sledovaná ABTS a EPR technikou
5Po11	*J. Bystrická, M. Timoracká, J. Musilová, T. Tóth, P. Trebichalský*	Úroda a obsah makroprvkov v koreni petžlenu obyčajného po aplikácii fenolických zlúčenín
5Po12	*V. Čuba, M. Pospíšil, P. Kovařík, V. Múčka, R. Silber*	Radiační redukce Co^{2+} a Ni^{2+} iontů ve vodných roztocích
5Po13	*B. Drtinová, M. Pospíšil, V. Čuba*	Vliv tuhých promotorů (kovové oxidy) na radiační odstraňování olova a kadmia z vodných roztoků
5Po14	*M. Dvořáková, I. Valterová, T. Vaněk*	Biotransformace monoterpenických směsí
5Po15	*A. Eisner, J. Chalánková, V. Ježová, M. Adam, K. Ventura*	Stanovení aditiv explozivních materiálů ve vzorcích životního prostředí
5Po16	*M. Fikselová, H. Frančáková*	The use of the carrots for obtaining of carotenoids concentrate for food industry
5Po17	*A. Gajdošová, B. Hozová*	Význam a stanovenie cereálnych beta-glukánov
5Po18	*L. Güllová, M. Jancurová, M. Kostičová, A. Dandár*	Stanovenie stupňa kontaminácie v cukrovarnických šťavách meraním obsahu kyseliny mliečnej
5Po19	*A. Hegedűsová, O. Hegedűs, K. Jomová, I. Belko*	Vplyv pôdnych sorbentov na zníženie obsahu kadmia a dusičnanov v mrkve
5Po20	*J. Hrbáč, Č. Gregor, T. Zelený*	Homemade electrochemical system for fabrication and operation of microelectrodes such as nitric oxide sensor
5Po21	*J. Hrdličková, T. Vidláková, I. Márová, M. Drábková*	Use of transgenic Escherichia coli cells transformed by CRT genes from Erwinia carotovora to production of lutein, lycopene and beta-carotene
5Po22	*T. Hubka, K. Komárek, M. Šafaříková, I. Šafařík, P. Pitter, V. Sýkora, H. Kujalová*	Využití chromatografických náplní jako sorbentů pro extrakci alkylfenolů magnetickou tuhou fází
5Po23	*K. Jomová, M. Zima, M. Morovič, A. Hegedűsová*	Vplyv ťažkých kovov na syntézu proteínov
5Po24	*K. Jomová, M. Zima, A. Hegedűsová, T. Tóth*	Vstup ťažkých kovov do konzumnej časti C. arietinum L. v závislosti od pôdnych vlastností
5Po25	*K. Jurečková, H. Parschová, R. Burda, Z. Matějka*	Selektivní sorpce oxoaniontu Se(IV) pomocí sorbentů s hydratovaným oxidem železitým

5Po26	*Z. Kabelová, M. Novotná*	Studium mechanismu vazby huminových látek na přírodní materiál - klinoptilolit
5Po27	*J. Kameník, F. Šebesta*	Studium záchytu europia na pevném extrahentu CMPO-PAN
5Po28	*K. Komárek, M. Šafaříková, M. Kandelová I. Šafařík*	Extrakce uhlovodíků nižších ropných frakcí z vodných roztoků magnetickou tuhou fází
5Po29	*L. Korecká, J. Křenková, N. Minc, J. L. Viovy, Z. Bílková*	Chip-based bioaffinity reactor with immobilized anhydrotrypsin for isolation of specific tryptic peptides of human neurotensin
5Po30	*M. Kostičová, K. Ochránková, L. Güllová, A. Dandár*	Vplyv zníženia prídavku vápna na kvalitu technologických štiav počas výroby cukru
5Po31	*P. Krausová*	Biologicky aktivní polyaminy v hovězím a vepřovém mase a v játrech
5Po32	*V. Kryštof, P. Džubák, M. Hajdúch, P. Cankař, J. Slouka, M. Paprskářová, J. Rolčík, P. M. Fischer, M. Strnad*	4-Fenylazo-3,5-diaminopyrazolové inhibitory cyklin-dependentní kinasy 9
5Po33	*A. Kryštofová, J. Horký*	Naše zkušenosti s chemotaxonomickou identifikací fytopatogenních bakterií
5Po34	*J. Kubešová, A. Mikulcová, E. Tihlářová, R. Chvátalová, P. Ptáček, S. Macuchová, I. Márová*	Using S. cerevisiae D7 and E. gracilis for testing antimutagenicity of white and red wines
5Po35	*J. Kufčáková, M. Galamboš, P. Rajec*	Sorption of strontium on selected group of bentonites
5Po36	*K. Kukurová, V. Soukupová, J. Karovičová, M. Voldřich*	Detection of sugar syrups addition to honey
5Po37	*J. Lehkoživová, J. Karovičová, M. Suhaj, K. Kukurová, Z. Kohajdová, J. Čimbora*	The evaluation of soft drinks
5Po38	*J. Leskova, J. Seidlerova*	Fine dust particles from metallurgical works: surface properties, heavy metals mobility and biotoxicity
5Po39	*B. Loupancová, E. Vítová, L. Hrozová, H. Štoudková, M. Fišera*	Změny mastných kyselin v tepelně ošetřených tavených sýrech
5Po40	*S. Macuchova, R. Kotrla, I. Marova, R. Mikulikova*	Influence of food supplements containing antioxidants and/or PUFA on selected metabolic functions in humans
5Po41	*M. Matulová, P. Capek, S. Jamrichová, M. Drončovský, L. Želiba*	Exopolysaccharides produced by lactic acid bacteria
5Po42	*K. Míčková, P. Blafková, J. Černá, J. Čopíková, A. Synytsya, Alla Synytsya, J. Spěváček, I. Jablonský, V. Erban*	Isolace β-glukanů z jedlých hub
5Po43	*A. Mikulcová, S. Macuchová, E. Tihlářová, R. Chvátalová, P. Ptáček, J. Kubešová, I. Márová*	Study of antimutagenic and antioxidative characteristics of natural fruit and vegetable juices
5Po44	*R. Burda, E. Mištová, Z. Matějka, L. Jelínek, M. Hrubý, M. Beneš*	Selektivní sorpce Ge, Mo, V a W pomocí sorbentu s diethanolaminovou funkční skupinou na akrylátovém skeletu
5Po45	*J. Musilová, R. Stanovič, A. Vollmannová, L. Lahučký, S. Melicháčová*	Porovnanie účinku anorganických a organických sorbentov pri znižovaní fytotoxicity kadmia
5Po46	*J. Novák, J. Kozler, B. Antošová*	Příprava huminových látek oxidací uhlí
5Po47	*P. Olejníková, Z. Ondrušová, R. Pokorný, D. Hudecová, L. Varečka*	Lignite filamentous fungi - isolation, characterization and induction of resistance
5Po48	*Z. Ondrušová, P. Olejníková, L. Varečka, D. Hudecová*	Lignite fungi: some characteristics of their metabolism
5Po49	*P. Oravec, I. Pandová, J. Mačala*	Chemicky modifikované zeolity. Časť I. Znižovanie obsahu oxidu dusnatého vo výfukových plynoch zážihových motorov
5Po50	*M. Otyepka, I. Bártová, Z. Kříž, J. Koča*	Dynamika regulačních enzymů buněčných procesů CDK2 a CDK5 studovaná molekulovou dynamikou
5Po51	*M. Paprskářová, V. Kryštof, M. Strnad, D. Moravcová, L. Havlíček*	Disubstituované pyrazolo[4,3-D]pyrimidiny s antiproliferačním účinkem
5Po52	*K. Pawłowska-Góral, M. Wardas, P. Wardas, A. Rzepecka-Stojko*	Vitamin E influence on antioxidant status in acute poisoning of rabbits
5Po53	*O. Prokeš, D. Římanová*	Enviromentální aspekty použití zkapalněného uhlovodíkového plynu v průmyslu a energetice
5Po54	*L. Robešová, L. Svoboda, J. Kühn*	Hnojiva se sníženým vyplavováním živin
5Po55	*A. Rodová, T. Pittner, L. Veselá, P. Žáčková*	Využití oxidačně-redukčních technologií k sanaci vod a půd kontaminovaných organickými látkami a těžkými kovy
5Po56	*M. Rucki, M. Tichý, Z. Roth*	Rozdělovací koeficient n-oktanol/voda K_{ow} a toxicita binárních směsí
5Po57	*M. Šafaříková, P. Luňáčková, I. Kibriková, K. Komárek, T. Hubka, I. Šafařík*	Předkoncentrace tergitolu z reálných vzorků vod pomocí magnetických adsorbentů

5Po58	*V. Sedláček, I. Kučera, O. Janiczek*	Purification and some new kinetic parameters of FerB enzyme from Paracoccus denitrificans
5Po59	*Z. Sejáková, K. Dercová, G. Barančíková, Z. Čechová*	Využitie organo-minerálnych komplexov pri bioremedácii kontaminovaných pôd
5Po60	*M. Schmidt, J. Berka, J. Kočica*	Organické látky vznikající spalováním halogenovaných organických látek
5Po61	*L. Sihelníková, A. Synytsya, J. Čopíková*	N-alkylpektinamidy jako sorbenty pro kyselinu cholovou
5Po62	*J. Sochacka, A. Kowalska*	Biological activity of synthetic purine derivatives - examination with algal assay
5Po63	*A. Kowalska, J. Sochacka*	Comparison of lipophilicity calculated and determined by RP-TLC method of 2-substituted 6-oxo- and 6-thioxo-7-methylpurines
5Po64	*P. Staffová, M. Němec, J. John*	Stanovení celkové aktivity alfa a beta metodou kapalinové scintilační spektrometrie
5Po65	*J. Šuľaková, F. Šebesta, J. John*	Pevné extrahenty na báze malonamidov, diglykolamidov a pyridínov pre separáciu lantanoidov a aktinoidov z vysokoaktívnych kvapalných odpadov
5Po66	*M. Šulc, V. Pivec, J. Lachman, M. Orsák*	Antiradical activity and polyphenolic antioxidants in grapes (Vitis vinifera L.) in the Czech wine-growing area
5Po67	*I. Švec, M. Hrušková, M. Krpálková, O. Jirsa*	Změny vlastností fermentovaného těsta přídavky mléčných produktů
5Po68	*S. Řezková (Táborská), J. Královský, M. Adam, D. Kahoun, T. Bajer*	Kapalinová chromatografie aminokyselin
5Po69	*J. Tomáš, D. Bajčan, P. Lazor, K. Pariláková, J. Noskovič, P. Kováčik*	Overenie vhodnosti aplikácie mletej horečnatej horniny získanej pri výrobe magnezitu
5Po70	*T. Tóth, J. Tomáš, P. Lazor, J. Chlpík, K. Jomová, A. Hegedüsová*	Rizikové prvky v pôdach a plodinách Štiavnického regiónu
5Po71	*A. Trilčová, J. Čopíková, M. A. Coimbra, M. Suchánek, H. Křístková, A. Synytsya*	Využití chemometrie při sledování kvality kakaového prášku
5Po72	*A. Trpišovský, L. Jelínek, Z. Matějka, M. Kolář, J. Krýsa*	Sorpce chlorovaných organických sloučenin na neionogenních sorbentech a fotokatalytická oxidace regeneračního činidla
5Po73	*Z. Gálová, J. Hoblík, D. Urminská, I. Michalík, J. Petr*	Bielkovinové determinanty celiakálneho ochorenia
5Po74	*D. Urminská, E. Sendrejová, I. Michalík*	Zvýšenie výživnej kvality zrnín enzymatickou transformáciou
5Po75	*F. Pudil, R. Uvíra, V. Janda*	Těkavé látky sušeného smrže špičatého (Morchella conica)
5Po76	*P. Brynych, T. Zoufalý*	Ječmenný hydrolyzát nové generace pro výrobu piva
5Po77	*E. Mištová, H. Parschová, L. Jelínek, Z. Matějka, M. Beneš, F. Šebesta*	Selektivní sorpce oxoaniontů kovů pomocí chemicky modifikované hnědé mořské řasy Ascophyllum nodosum
5Po78	*K. Valentová, P. Kosina, V. Křen, J. Ulrichová, V. Šimánek*	Variabilita složení sacharidů v hlízách jakonů (Smallanthus sonchifolius)
5Po79	*A. Vargová, O. Hegedűs, A. Hegedűsová*	Môže byť antioxidant toxický?
5Po80	*M. Veselá, M. Veselý, B. Kremláčková*	Epifluorescenční metoda pro sledování účinnosti fotokatalytické dekontaminace
5Po81	*A. Vollmannová, J. Tomáš, T. Tóth, M. Timoracká, B. Škarbová*	Spôsoby úpravy vzoriek strukovín pre stanovenie obsahu vybraných flavonoidov metódou HPLC
5Po82	*L. Zahradníková, Š. Schmidt, S. Sekretár*	Porovnanie účinnosti niektorých prírodných antioxidantov
5Po83	*P. Zachař, V. Král, V. A. Borek, L. Kodýmová*	Oxidace biologicky a environmentálně významných sloučenin s katalyzátory na bázi nanočástic s porfyrinovým skeletem - studium selektivity
5Po84	*L. Kohl, P. Zachař*	Speciace organortuťnatých sloučenin v rybí matrici metodou GC/MS, posouzení derivatizačních a extrakčních postupů
5Po85	*P. Zelík, J. Kopecký, A. Lukešová*	Screening for acetylcholinesterase inhibitors of microalgae origin

Sekcia 6 - CHEMPROGRESS

6Po01	*P. Mokrejš, F. Langmaier, M. Mládek, K. Kolomazník*	Dvoufázová hydrolýsa hovězích chlupů
6Po02	*A. Martaus, B. Doušová*	Mechanismus a kinetika adsorpce anorganických forem As na sorbentech na bázi Fe
6Po03	*J. Muselík, K. Krejčová, M. Steklá, L. Vorlová, S. Marton, M. Rabišková*	Stanovení tloušťky obalu u pelet metodou blízke infračervené spektroskopie (NIR)
6Po04	*J. Trejbal, M. Petrisko, J. Pašek*	Termodynamické aspekty technologie 1,4-diazabicyklo[2,2,2]oktanu a výběr vhodných surovín
6Po05	*D. Vetchý, M. Novotná, M. Rabišková, T. Volný, E. Gryczová, A. Häring, M. Švarcová, T. Sýkora*	Příprava sférického granulátu horním postřikem v zařízení Aeromatic MP-1
6Po06	*P. Mokrejš, F. Langmaier, M. Mládek, K. Kolomazník*	Tepelné charakteristiky kolagenních hydrolysátu
6Po07	*P. Čermák, V. Glaser, J. Vídenský, I. Sedlářová*	Aplikace modelu nezreagovaného jádra k popisu reakce oxidu zinečnatého se sulfánem
6Po08	*A. Vincze, M. Kytka, J. Kováč, J. Jakabovič*	SIMS investigation of OLED structure based on Alq_3
6Po09	*P. Mokrejš, K. Kolomazník, M. Mládek, F. Langmaier*	Separace hořčíku z chromitého kalu vícefázovým vymývaním
6Po10	*M. Michalka, J. Škriniarová, J. Bruncko*	Úprava povrchu GaAs pred pulznou laserovou depozíciou
6Po11	*H. Mäsiar, N. Kaloforov*	Účinok veľmi malých množstiev polyetylénoxidu na vybraných druhoch formovacích zmesí z výroby
6Po12	*H. Mäsiar, N. Kaloforov*	Veľmi malé množstvá polyetylénoxidu s molekulovou hmotnosťou 600 000 modifikátorom niektorých základných technologických vlastností jadrových zmesí zlievarenských na báze alkalických fenolových živíc

1PP1

KAM SMĚŘUJE ELEKTROANALYTICKÁ CHEMIE

Jiří Barek

Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, katedra analytické chemie, UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Albertov 6, CZ 128 43 Praha 2, Česká republika, Barek@natur.cuni.cz

Moderní elektroanalytické metody představují i při dnešní silné konkurenci spektrometrických a separačních technik vzhledem ke své citlivosti, rychlosti a ekonomické nenáročnosti užitečnou a perspektivní alternativu zejména v oblasti environmentální analýzy. Tento příspěvek bude představovat jakýsi pokus o prognózu vývoje elektroanalytické chemie v nadcházejícím období, který bude vycházet jak z dosavadního stavu a vývoje tak i z neustále rostoucích nároků na analytickou chemii. Na konkrétních metodách vyvinutých v UNESCO laboratoři elektrochemie životního prostředí budou demonstrovány možnosti a omezení a další perspektivy vývoje moderních voltametrických metod na rtuťových elektrodách [1], uhlíkových pastových elektrodách [2] a dalších elektrodách z netradičních elektrodových materiálů [3], jako jsou např. tuhé amalgámové elektrody, borem dopované diamantové filmové elektrody, bizmutové filmové elektrody, chemicky modifikované elektrody, elektrody se snadno obnovitelným povrchem na bázi uhlíkových filmů atp. Pozornost bude věnována i kombinaci moderních elektroanalytických metod s průtokovými metodami umožňujícími podstatné zkrácení doby analýzy (průtoková injekční analýza, sekvenční injekční analýza) či výrazné zvýšení selektivity (vysokoúčinná kapalinová chromatografie, elektromigrační metody). Diskutováno bude zejména využití výše uvedených technik pro stanovení submikromolárních až nanomolárnich koncentrací vybraných biologicky aktivních organických látek významných z hlediska ochrany lidského zdraví a životního prostředí jako jsou chemické karcinogeny, protinádorová léčiva, vybrané herbicidy atp. Na základě srovnání s vývojovými trendy v oblasti moderních spektrometrických a separačních metod bude učiněn pokus o vymezení budoucí role elektroanalytické chemie ve výzkumných i rutinních laboratořích a o vytipování nejperspektivnějších oblastí pro další výzkum.

Tento výzkum je finančně podporován Grantovou agenturou České republiky (grant 203/03/0182).

[1] Barek J., Fogg A.G., Muck A., Zima J., *Crit. Rev. Anal. Chem.* 31, 291-309 (2001).
[2] Švancara I., Vytřas K., Barek J., Zima J., *Crit. Rev. Anal. Chem.* 31, 311-345 (2001).
[3] Barek J., Moreira J., Zima J., *Sensors*, 5, 148-158 (2005).

1PP2

SMEROM KU SPEKTROSKOPICKEJ PRESNOSTI PRI KVANTOVOCHEMICKÝCH VÝPOČTOCH

Jozef Noga[1,2]

[1]*Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prírodovedecká fakulta UK, 842 15 Bratislava*
[2]*Ústav anorganickej chémie SAV, 84536 Bratislava, Jozef.Noga@savba.sk*

Okrem kvalitatívnej interpretácie experimentu, medzi ciele kvantovej výpočtovej chémie patria i kvantitatívne predpovede energií a vlastností molekúl, schopné svojou spoľahlivosťou nahradiť často veľmi náročný či v praxi neuskutočniteľný experiment. Aj keď je zrejmé, že takýto cieľ bude sotva možné dosiahnuť pre väčšie systémy chemického záujmu, tejto oblasti kvantovej chémie sa počas posledných 25 rokov venovalo značné úsilie a dosiahol sa významný pokrok. Už od zrodu kvantovej chémie je známe, že orbitálový model molekuly, vyplývajúci z jednoelektrónového priblíženia, na spomenutý kvantitatívny popis nestačí.

V príspevku bude stručne predstavená teória s explicitným zahrnutím elektrónovej korelácie do vlnovej funkcie v rámci metódy spriahnutých klastrov (CC-R12) zavedená zhruba pred desiatimi rokmi [1]. Táto teória je zovšeobecnením pôvodného, tzv. R12 prístupu Kutzelnigga [2] a v uplynulom období sme ukázali, že (zatiaľ) pre malé molekuly možno dosiahnuť presnosť vypočítaných energií a vlastností porovnateľnú s experimentom. Použitie CC-R12 metódy v kombinácii so špecificky R12-optimalizovanými bázami poskytuje výsledky, ktoré dosahujú limitu bázy i bez extrapolácií a oproti konvenčným výpočtom sa neurčitosť výsledkov znižuje zhruba o jeden poriadok [3]. Aplikácie okrem totálnych energií zahrňujú elektrické vlastnosti, spektroskopické parametre a potenciálové hyperplochy molekúl s uzavretými i otvorenými elektrónovými hladinami, ako i slabo viazané molekulové komplexy astrochemického významu.

[1] J. Noga, W. Kutzelnigg, *J. Chem. Phys.*, 101, 7738 (1994).
[2] W. Kutzelnigg, *Theor. Chim. Acta*, 68, 445 (1985).
[3] J. Noga, P. Valiron, in: *Computational Chemistry: Reviews of Current Trends*, Vol. 7, p. 131-185 (Ed.: J. Leszczynski), World Scientific, Singapore, (2002).

1PP3

ANALYTICKÁ CHÉMIA NA ČIPOCH

Dušan Kaniansky, Marián Masár, Róbert Bodor

Katedra analytickej chémie, Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského, Mlynská dolina CH-2, 84215 Bratislava
kaniansky @fns.uniba.sk

V analytickom výskume (a nielen tu) je zreteľná orientácia na miniaturizované analytické systémy (koncepcia „lab-on-a-chip“). Tento významný trend, s väzbou na mikroelektronické a mikrostrojárske výrobné technológie, v skutočnosti vytvára predpoklady pre dosiahnutie ekonomicky prijateľných východísk pre široké uplatnenie metód analytickej chémie v spoločenskej praxi.

Miniaturizácia analytických systémov je apriori spojená so širším využitím separačných metód. Ich hlavnou úlohou je predúprava vzoriek (v tom najširšom kontexte) pred vlastným meraním, ktoré poskytuje požadovaný analytický signál.V súčasnosti sú preferované najmä metódy elektroseparačné, pretože ich miniaturizácia je technicky menej náročná v porovnaní s metódami chromatografickými. Tento stav nepochybne pôsobí inovatívne aj na výskum v oblasti chromatografických separácii.

Potenciál elektroseparačných metód (zónová elektroforéza, izotachoforéza a izoelektrická fokusácia) v miniaturizácii je daný aj tým, že tieto využívajú identický separačný systém a ich praktická implementácia sa dosahuje prostredníctvom roztokov elektrolytov. Touto jednoduchou cestou sa, napríklad vytvára rozdielna priestorová distribúcia látok po ich separácii, dosahuje sa požadovaná koncentrácia separovaných látok a špecificita pre látky amfolytickej povahy (napríklad, pre proteíny).

Elektroseparačné metódy sú navzájom kombinovateľné a týmto poskytujú prostriedky na odstránenie matrice zo vzorky a/alebo vnášajú do miniaturizovaných systémov prvky multidimenzionality separácii (prostriedky významné v analýze mnohozložkových zmesí látok).

Cieľom tejto prezentácie je ukázať úlohu a význam súčasných prostriedkov analytickej chémie na úrovni miniaturizovaných systémov.

1PP4

RELATIVISTICKÉ EFEKTY V ORGANICKÝCH BIRADIKÁLECH

Zdeněk Havlas

Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha 6, Česká republika

Relativistické efekty jsou zodpovědné za přechody mezi elektronovými stavy molekul o různé multiplicitě a za jemné štěpení stavů tripletů (a vyšších multipletů, které však v organické chemii nejsou tak podstatné). Nejdůležitější jsou spin-orbitální interakce, podstatné pro fotochemické procesy, a spin-spinové dipolární interakce, měřitelné v tripletech jako štěpení v nulovém poli (ZFS - Zero Field Splitting).

Po diskusi o formě a působení relativistických Hamiltoniánů na nerelativistické vlnové funkce budou prezentovány ukázky praktických výpočtů na štěpení triplexových stavů m-xylylenu, singlet-tripletových přechodů u tetramethylenethanu, předpověď inversního efektu těžkého atomu u spin-orbitální vazby a na předpověď jemného štěpení u aryl-nitrenů.

V závěru budou krátce zhodnoceny výpočetní postupy založené na CASSCF výpočtech nerelativistických vlnových funkcí stavů a na použití Breitova-Pauliho relativistického Hamiltonianu a diskutována přesnost vypočtených charakteristik.

2PP1

OD MOLEKULÁRNÍCH PREKURZORŮ K MATERIÁLŮM

Jiří Pinkas

Katedra anorganické chemie, Př.F. Masarykovy univerzity v Brně, Kotlářská 2, 611 37 Brno, jpinkas@chemi.muni.cz

Zájem anorganické chemie se v poslední době stále více soustřeďuje na hledání nových způsobů přípravy klasických i pokročilých materiálů. Namísto reakcí probíhajících za vysokých teplot v pevné fázi jsou hledány vhodné reakce v roztocích, které probíhají za daleko mírnějších podmínek a které je možno lépe řídit změnou reakčních parametrů. Získané produkty pak mají složení, strukturu, morfologii a velikost částic ovlivnitelnou výběrem prekurzorů a podmínek reakce. Mezi tyto chemické postupy můžeme zařadit sol-gelovou metodu v její hydrolytické a nehydrolytické variantě, syntézu molekulárních stavebních jednotek s jejich chemickou modifikací a následnou kondenzací za vzniku třírozměrných struktur, sonochemickou iniciaci reakcí vedoucích k nanoskopickým produktům, a syntézu koordinačních polymerů.

Klasickou sol-gelovou metodu s využitím vodných roztoků solí a různých gelačních činidel jsme použili pro studium přípravy perovskitových a granátových fází s variabilním stupněm substituce u systémů jako $La_{1-x}Sr_xAlO_{3-\delta}$, $Gd_{1-x}Sr_xCoO_3$ a $Y_3Sc_{5-x}Ga_xO_{12}$. Nehydrolytická obdoba sol-gelové metody využívá kondenzačních reakcí založených na eliminaci malých organických molekul s vyloučením vody jako zdroje oxidického kyslíku [1]. Studovali jsme např. přípravu mullitového gelu kondenzací dimethylamidu hlinitého a octanu křemičitého za vyloučení dimethylacetamidu nebo obdobnou reakci vedoucí k směsnému oxidu titanu a křemíku. Jako prekurzory oxidu hlinitého jsme připravili sérii chloridů-alkoxidů hlinitých a studovali jejich strukturu a chemickou reaktivitu v kondenzačních reakcích.

Další z námi použitých metod je příprava molekulárních prekurzorů a jejich následná kondenzace do třírozměrných struktur. Zaměřili jsme se na syntézu molekulárních stavebních jednotek hlinitofosfonátů, hlinitofosforečnanů, hlinitosulfonátů a titanokřemičitanů. Studovali jsme vhodné metody syntézy těchto prekurzorů založené na reakcích fosfonových kyselin s alkylkovy, reakcích trimethylsilylesterů kyselin s amidy a imidy kovů nebo alkylkovy [2]. Stanovili jsme molekulovou strukturu vzniklých produktů a následně zkoumali jejich spektroskopické vlastnosti a chemickou reaktivitu. Připravili jsme celou řadu cyklických a klecovitých (kubických, prizmatických a adamantoidních) molekul a ověřili reaktivitu jejich substituentů s cílem najít vhodné podmínky pro kondenzaci jednotek do zesíťovaných struktur. Připravené materiály byly charakterizovány pomocí termické analýzy, infračervené spektroskopie, NMR spektroskopie v pevné fázi, stanovením měrného povrchu z měření adsorpční izotermy dusíku a elementární analýzou.

Sonochemickou metodu založenou na reakcích aktivovaných ultrazvukem jsme použili pro přípravu jednoduchých i směsných oxidů Cu, Fe, Co, Mn a Si. Jako prekurzory nám posloužily acetylacetonátové komplexy železa, kobaltu, manganu a mědi a oxalátové komplexy křemíku. Připravili Fe_2O_3, CoO, Mn_2O_3 a Co_3O_4 a vhodnou kombinací prekurzorů i $CoFe_2O_4$. Získané oxidy byly amorfní s velikostí částic od 5 nm do 100 nm. Všechny získané látky jsme charakterizovali pomocí elementární analýzy, termické analýzy, rentgenové práškové difrakce, infračervené spektroskopie, elektronové skenovací a transmisní mikroskopie.

Tato práce byla podporována granty MSM 0021622410 a GAČR 203/04/0296.

[1] Hay J.N., Raval H.M. *Chem. Mater.* 13, 3396-3403 (2001).
[2] Pinkas J., Wessel H., Yang Y., Montero M.L., Noltemeyer M., Fröba M., Roesky H.W. *Inorg. Chem. 37,* 2450-2457 (1998).
[3] Gedanken A. *Ultrasonics Sonochem.* 11, 47-55 (2004)

2PP2

COORDINATION AND BIO - COORDINATION CHEMISTRY: THE PAST, PRESENT, AND FUTURE

Milan Melník

Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak Technical University, 812 37 Bratislava, Slovak Republic

Oliver Sacks has written that „Chemistry has perhaps the most intricate, most fascinating and certainly most romantic history of all of the sciences“ - I supported this. Each researcher must take a risk, because if we are not taking risks, we are not doing very much. Periodic chart of the elements is such the most useful tool available to a chemist. The order system of the elements could be the one piece of communication that may be understood by any intelligent life form.

During the four decades of my acquaintance with coordination and bio-coordination chemistry, I have watched with great satisfaction as it grew from a highly specialized area of inorganic chemistry - „Renaissance in Inorganic Chemistry“, into of the most active and productive fields of chemistry today.

As we stand at the threshold of a future, it may be instructive to look back at past achievements in coordination and bio-coordination chemistry. I would agree with Shakespeare's maxim „What is past is prologue“. We may discern some glimpses of the future of our field by examining its past.

This historical overview is confined to the major discoveries, both experimental and theoretical, in the evolution of the discipline. Because of space limitations, it is illustrative and selective rather than exhaustive, and I have had to omit many worthy contributions. Werner's monumental achievements occupied a central role and dominated the first decades of the 20th century. Even today they are still the basis for the latest developments.

During the first half of the nineteenth century discoveries of coordination complexes were few, sporadic, and often accidental. Werner's theory abruptly broke with classical theories of valence and structure, postulating two types of valence - primary (ionizable valence) and secondary (nonionizable valence), led to present concepts of ionic and covalent bonding, respectively.

Werner's coordination theory[1] was accepted by most chemists. Systematic studies in the field of stereo selectivity of coordination compounds have rapidly found a wide interest. It is noteworthy that the problem of stereo selectivity in coordination compounds is very often related to the well - know stereo chemical specify of biological systems, catalysis and the stereo chemical effect in technical processes, etc.

Despite the success of Werner's coordination theory, several twentieth - century chemists, such as Friend[2], Briggs[3] and Povarnin[4], critized or modified it and offered alternative explanations for coordination compounds. Pfeiffer[5] the first applied coordination theory to crystal structures, proposed modifications of Werner's theory. Pfeiffer applied his principle of „affinity adjustments of the valences“ to answer certain shot comings of Werner's theory. Pfeiffer's application of Werner's theory to crystals and the advent of new experimental techniques led a number of scientists in various countries to use X-ray diffraction to determine crystal structures of coordination compounds.

Sidgwick[6] tried to explain coordination number according to the sizes of the subgroups of electrons in the Bohr atom, and he systematized coordination numbers in his „effective atomic number“ concept. He regarded ligands as Lewis bases which donate electrons to the metal atom, which consequently acts as a Lewis acid. Chernayev's trans effect[7] has had a considerable influence on the synthetic chemistry of coordination compounds.

Despite the guiding star of Werner's coordination theory, classical coordination chemistry was largely empirical. Modern coordination chemistry has been characterized by increased emphasis on comprehensive theories of chemical

bonding that have served to integrate and explain the large amount of experimental data. Pauling and Slater developed the valence bond theory of coordination from Newton Lewis's covalent model. Closely related to theories of hybridization and resonance, this theory was the first successful application of the electronic theory of valence to coordination compounds.

Kossel's ionic model was revitalized and developed into the crystal field theory of coordination by Bethe and Van Vleck. When modified to include some degree of covalence, crystal field theory is usually known as ligand field theory and is currently the best and most popular method for treating spectra and other properties quantitatively. A simple electrostatic theory is the valence - shell electron - pair repulsion theory of directed valence, proposed by Gillespie and Nyholm Both valence bond theory and crystal field theory are only simplifications of the more general but more complicated molecular orbital theory, which today offers the best interpretation of the properties of coordination compounds.

Another characteristic of modern of coordination chemistry is the increasing reliance upon physico-chemical methods unknown to Werner and his contemporaries. Simultaneously with an introduction of these newer techniques, emphasis shifted from preoccupation with qualitative studies of structure and stereochemistry to quantitative studies of thermodynamics, kinetics and reaction mechanism.

Chronological list of some historically significant events in coordination and bio-coordination chemistry have not been included because of lack of space, but it will be exhibit in my lecture. Having moved from the past to the present, what then is the likely future of coordination chemistry? Very clearly current fashions and realities indicate a multi disciplinary development, particularly in the life sciences. We chemist are different from biologists and physicists in what in addition to studying and trying to unravel principles of how the natural world works, we are also in inventors.

Now is the time to converge chemistry and biology again and have the two fields ignite reach other. Once chemists understand the biology and know what the issue really is, they can make tremendously creative contributions in areas such as experimental design. The irony is that the power of chemical sciences, is a function of what they create as a whole: an enabling infrastructure that delivers the foods, fuels, medicines and materials that are the hallmarks of modern life.

So what are the current „hot topics“? These may include:

- scientific rationalization of observed experimental behavior and practical needs;
- thinkable uses of a single - molecule electrochemistry of coordination compounds directed towards molecular electronic;
- metal complexes in supramolecular assembles for use in catalysis in optical and magnetic devices;
- development of new materials for nanoscience and nanotechnology;
- bio - transformations, particularly evolution, conversion of nitrogen into ammonia, multi - electron transfer processes and methane oxidation - all under ambient conditions, and water oxidation;
- metal complexes in biology - either for (i) medical purposes such as chemotherapy or (ii) the identification of metal complexes cores in biological functions;
- use of coordination compounds as optical triggers and probes, particularly with respect to long - distance electron tunneling in proteins;
- design and preparation of a novel "coordination" drugs of applying in human and veterinary medicine;
- investigation of substances and system applying as new material and catalysts acting to the protection of environment;
- mechanism by which metal ions complex with physiological, pharmacological or environmental ligands in order to influence the onset, progression or treatment of disease.

Finally, I would like to pay attribute to Lord Kelvin and plead his argument:

I often say that when you can measure what you are speaking about, and express it in numbers, you know something about it; but when you cannot express it in numbers, your knowledge is of a meager and unsatisfactory kind; it may be the beginning of knowledge, but you have scarcely, in you thoughts, advanced to the stage of SCIENCE, whatever the matter may be.

[1] G.B. Kauffman, A. Werner, *Founder of Coordination Chemistry, Springer - Verlag, Berlin Heilderberg, New York, 1996*
[2] J.A.N. Friend, *J. Chem. Soc., 109*, 715, (1916)
[3] S.H.C. Briggs, *J. Chem. Soc., 93,* 1564, (1908)
[4] G. Povarnin, *J. Russ. Phys. Chem. Soc., 47,* 2073, (1915)
[5] P. Pfeiffer, *Z. Anorg. Chem., 192, 376, (1915)*
[6] N.V. Sidgwick, *J. Chem. Soc*., 123, 725, (1923)
[7] I.I. Chernayev, *Izv. Ins.po Izuchemii Platiny i Drug. Blagorod. Met., 4,* 243, (1926)

2PP3

SMEKTITY, CHEMICKY ZAUJÍMAVÉ ÍLOVÉ MINERÁLY

Peter Komadel

Ústav anorganickej chémie SAV, 845 36 Bratislava, uachkomp@savba.sk

Smektity sú ílové minerály zložené zo záporne nabitých vrstiev a vymeniteľných katiónov. Majú schopnosť napučiavať, teda meniť vzdialenosť vrstiev, v závislosti od podmienok, v ktorých sa nachádzajú. Chemické zloženie vrstiev, a tým aj ich náboj, sú rôzne, a z toho vyplýva značná variabilita vlastností smektitov. Často sa chemicky modifikujú pre základný aj aplikovaný výskum aj pre ich využitie. Najznámejším smektitom je montmorillonit, ktorý je dominantným minerálom v bentonitoch, dôležitých nerudných surovinách, ťažených a využívaných na Slovensku aj v Čechách. Najbežnejšou modifikáciou smektitov je výmena vymeniteľných katiónov za iné anorganické alebo organické katióny. Priamy súvis s výrobou má kyselinová aktivácia, využívaná pri výrobe adsorbentov, tzv. bieliacich hliniek. Sú to bentonity čiastočne rozložené v kyselinách, zložené z pôvodných minerálov a z tuhého reakčného produktu, ktorým je mikrokryštalický, čiastočne protonizovaný oxid kremičitý. Porovnajú sa výsledky sledovania priebehu reakcie klasickými a spektroskopickými metódami [1]. Chemicky možno modifikovať aj náboj vrstiev smektitov. Zahrievanie monoiónových foriem montmorillonitu, nasýtených malými katiónmi, napr. Li^+, spôsobuje ich fixáciu vo vrstvách. Prestávajú byť vymeniteľnými katiónmi, a tým nastáva pokles záporného náboja vrstiev [2,3]. Jediným prvkom často sa vyskytujúcim vo vrstvách smektitov, ktorý je relatívne stály v dvoch oxidačných stupňoch, je železo. Redukcia štruktúrneho Fe(III) na Fe(II) spôsobuje nárast negatívneho náboja vrstiev.

[1] P. Komadel, J. Madejová, M. Janek, W.P. Gates, R.J. Kirkpatrick, J.W. Stucki, *Clays and Clay Minerals, 44*, 228-236, (1996)
[2] P. Komadel, J. Madejová, J. Hrobáriková, M. Janek, J. Bujdák, *Solid State Phenomena, 90-91*, 497-502, (2003)
[3] P. Komadel, J. Madejová, J. Bujdák, *Clays and Clay Minerals, 53*, 313-334, (2005)

2PP4

HROTOM INDUKOVANÉ PROCESY: NANOMANIPULÁCIA A MECHANOCHÉMIA

Ivan Štich

CCMS, Fakulta elektrotechniky a informatiky STU v Bratislave, Ilkovičova 3, Bratislava
e-mail - stich@elf.stuba.sk

Nanohrot mikroskopov s atomárnou rozlišovacou schopnosťou, napr. statického a dynamického AFM je možné použiť na realizovanie fascinujúcich nanoexperimentov za využitia len mechanickej energie hrotu. Príkladom je nanomanipulácia atómov chemisorbovaných na povrchoch a mechanochémia, kde funkciu tradičnej tepelnej energie zohráva mechanická energia hrotu. Tieto experimenty majú obvykle vysokú reprodukovateľnosť ale ich detailné porozumenie na atomárnej/molekulovej škále je často možné len za pomoci sofistikovaných kvantovomechanických simulácií. Potenciál takýchto simulácií ukážeme na dvoch príkladoch: (1) anionovom antisite defekte na povrchu InP(110), kde ukážeme, ako je defekt, ktorý má dve (meta)stabilné geometrie, možné manipulovať za pomoci nanohrotu z jedného minima do druhého, (2) mechanochémie, kde pomocou organickej molekuly (tiolátu) chemisorbovaného medzi hrotom a povrchom mincových kovov (Cu, Au) je možné vytvárať nové nanoštruktúry, ako napr. nanoretiazky alebo klastre s novými štruktúrami s vysokou energiou.

3PP1

NOVÉ TRENDY V CHÉMII DIHYDROPYRIDÍNOV

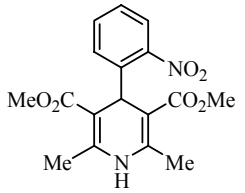
Štefan Marchalín

Katedra organickej chémie, Slovenská technická univerzita, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovenská republika
e-mail: stefan.marchalin@stuba.sk

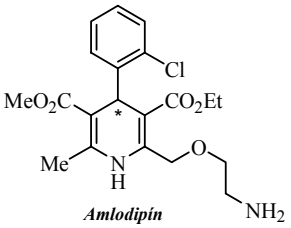
Dihydropyridíny predstavujú mimoriadne významnú skupinu heterocyklických zlúčenín, ktoré sú v poslednom období intenzívne študované. Toto kľúčové slovo sa napr. v posledných rokoch nachádzalo každoročne vo viac ako 350 dokumentoch v Chemical Abstracts. Záujem o syntézu a reaktivitu týchto zlúčenín je podmienený viacerými hlavnými faktormi: možnosťou využitia dihydropyridínov ako nových syntónov resp. medziproduktov v syntézach prírodných zlúčenín, ako aj ich širokou paletou biologickej aktivity s uplatnením v medicínskej chémii.

Substituované 1,4-dihydropyridíny Hantzschovho typu predstavujú skupinu blokátorov vápnikových kanálov s najvyššou afinitou a vazoselektivitou, preto sa používajú pri liečbe závažných ochorení kardiovaskulárneho systému, ako hypertenzie, anginy pectoris a niektorých arytmií. Základný komerčný derivát I. generácie-*Nifedipín*-spôsobuje mohutnú vazodilatáciu, ktorá sa môže okrem zníženia krvného tlaku prejaviť aj vedľajšími účinkami. Nežiadúce účinky *Nifedipínu* boli znížené u látok tzv. II. generácie

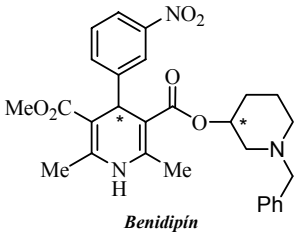
(Isradipín, Felodipín, Amlodipín, Benidipín, Nilvadipín), ktoré sa vyznačujú dlhším biologickým polčasom, vyššou cievnou selektivitou a lepšou znášanlivosťou. Zistilo sa, že u niektorých chirálnych dihydropyridínových derivátov jednotlivé enantioméry vykazujú nielen kvantitatívne, ale aj kvalitatívne rozdiely v ich farmakologickom účinku (kalcium antagonista resp. agonista). Z toho dôvodu je výskum v posledných rokoch orientovaný na syntézu chirálnych 1,4-dihydropyridínov. Pomerne nedávno boli objavené nové farmakologické vlastnosti 1,4-dihydropyridínov. Patria sem hlavne neuroprotektívne, antidiabetické, neuromodulačné, antivirálne a nootropické účinky. Tieto pyridínové deriváty sú taktiež intenzívne študované ako modely koenzýmu NAD(P)H za účelom objasnenia procesov biologických trasformácií. [1,2]



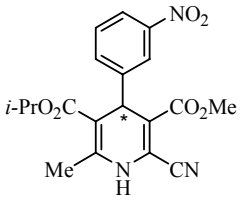
Nifedipín



Amlodipín



Benidipín



Nilvadipín

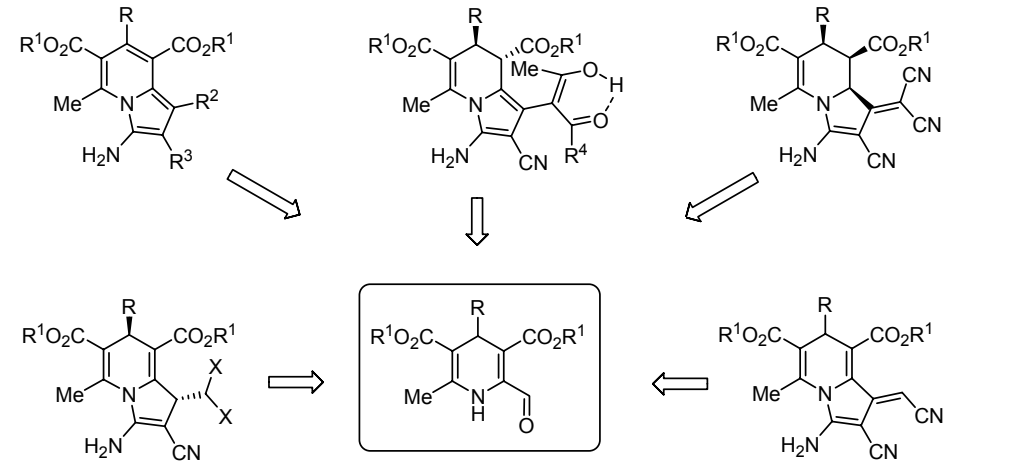
V oblasti 1,4-dihydropyridínov sa nám podarilo vypracovať novú syntézu Nilvadipínu, založenú na transformácii 1,4-dihydropyridín-2-karboxylovej kyseliny a 2-etinyl-1,4-dihydropyridínov, ktoré môžu byť použité pre prípravu nových 2-substituovaných 1,4-dihydropyridínov s potenciálnou biologickou aktivitou. Značný pokrok sme dosiahli v oblasti štúdia reaktivity veľmi málo preštudovaných 2-formyl-1,4-dihydropyridínov, ktoré sú medziproduktami pri syntéze komerčného liečiva Nilvadipínu.

V rámci nášho dlhodobého štúdia syntézy a reakcií 1,4-dihydropyridínových derivátov nás zaujímalo využitie vyššie spomenutých ľahko dostupných substituovaných 2-formyl-1,4-dihydro-pyridínov, ako nových variabilných syntónov pre syntézu kondenzovaných bi- a tricyklických heterocyklov so zabudovaným 1,4-dihydropyridínovým kruhom. Pri ich syntéze sa získali nové poznatky o reaktivite substituovaných 2-formyl-1,4-dihydropyridínových derivátov. Tieto sa využili na vypracovanie nových, jednoduchých a stereokontrolovaných prístupov k substituovaným indo-lizínom s rozličným stupňom nasýtenia, ako sú indolizíny, 3-amino-1,7(7,8)-dihydroindolizíny a 3-amino-1,7,8,8a-tetrahydroindolizíny. Modifikáciou reakčných podmienok (typ substrátu, činidlo-zlúčenina s aktívnou metylénovou skupinou, katalyzátor, rozpúšťadlo alebo teplota) je takto možné pripraviť rôzne nové typy substituovaných indolizínov. Aj keď mechanistické detaily týchto viaczložkových kaskádovitých reakcií by si vyžadovali ďalšie štúdium, všetky reakcie majú mimoriadny syntetický význam. Substituované indolizínové deriváty s definovanou konfiguráciou na stereogénnych centrách sa dajú získať vo veľmi dobrých výťažkoch a vysokej čistote. Doteraz známe alternatívne syntézy indolizínov z pyridínových derivátov sú limitované ťažkou dostupnosťou substituovaných pyridínov a podstatne nižšími výťažkami. [3]

Vyselektovaním vhodného substrátu sa nám v poslednom období podarilo vypracovať jednoduchú metódu štiepenia racemického 2-formyl-1,4-dihydropyridínu cez príslušné diastereoizomérne imíny, s využitím enantiomérov 2-fenyletylamínu, resp. novou metodológiou CIDR (kryštalizáciou indukovanou dynamickou rezolúciou) s využitím chirálnych aminotiolov. Takto je možné získať obidva enantioméry dietyl 2-formyl-6-metyl-4-(2-tienyl)-1,4-dihydropyridín-3,5-dikarboxylátu v multigramových množstvách, v dobrom výťažku a vysokej optickej čistote.

Táto práca vznikla s podporou grantu VEGA 1/2456/05.

[1] Lavilla R.: *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 1*, 2002, 1141.
[2] Sobolev A., Franssen M.C.R., Duburs G., De Groot A.E.: *Biocat. Biotransf. 22, 231(2004).*
[3] Marchalín Š., Chudík M., Cvopová K., Kožíšek J., Leško J., Daich A.: Tetrahedron 58, 5747 (2002).



R = aryl, heteroaryl; R^1 = alkyl; R^2 = H, alkenyl; R^3 = CN, COMe(Ph); R^4 = alkyl, aryl, OR^1; X = R^3, $PhSO_2$, NO_2

3PP2

BIODEGRADOVATEĽNÉ PLASTY - SÚČASNÝ STAV A PERSPEKTÍVY PRE VYSOKOTONÁŽNE APLIKÁCIE

Ivan Chodák, Gizela Miková

Ústav polymérov SAV, Centrum excelentnosti Cedebipo, Dúbravská 9, 842 36 Bratislava
upolchiv@savba.sk

Z environmentálneho hľadiska sa za akceptovateľné materiály s perspektívou v budúcnosti považujú jednak látky, výroba ktorých je založená na obnoviteľných zdrojoch surovín a jednak materiály, ktoré minimalizujú záťaž na životné prostredie. Biodegradovateľné plasty predstavujú skupinu perspektívnych materiálov najmä z hľadiska možnosti využitia v obalovej technike predovšetkým preto, že poskytujú alternatívu pre menežment narábania s odpadmi, keďže ich možno napríklad kompostovať, ale nemenej významná je aj možnosť ich získavania resp. výroby z obnoviteľných zdrojov, najmä biomasy.

Viaceré polyméry so schoposťou biodegradovať sú komerčne dostupné a v menšej miere sa využívajú najmä polykaprolaktón, polylaktidy, polyvinylalkohol a polyhydroxyalkanoáty. V súčasnosti však ich aplikácii v širokom rozsahu bránia predovšetkým dva faktory, a to relatívne vysoká cena a niektoré nevyhovujúce vlastnosti týchto plastov. Pri takýchto úvahách zvláštnu pozornosť zasluhujú polysacharidy napr. termoplastický škrob, kde naopak ekonomické hľadisko vyznieva veľmi priaznivo, ale problém predstavujú niektoré vlastnosti, predovšetkým krehkosť a nízka odolnosť voči vlhkosti.

Niektoré z týchto problémov sa dajú do značnej miery riešiť prípravou zmesí buď biodegradovateľných polymérov navzájom, alebo kompozitov s termoplastickou biodegradovateľnou matricou. Prípravou takýchto materiálov sme sa zaoberali predovšetkým s cieľom získať biodegradovateľné polymérne materiály, ktoré by svojimi vlastnosťami spĺňali požiadavky pre obaloviny. Ako príklady možno uviesť tri typy materiálov.

Jednak sú to zmesi polyhydroxybutyrátu (PHB) a polykaprolaktónu (PCL), kde PHB ako kontinuálna fáza dodáva výslednému materiálu mechanické vlastnosti, zatiaľ čo prídavok PCL rieši nadmernú neakceptovateľnú krehkosť PHB. Kompatibilizácia zosietením, iniciovaným termickým rozkladom organického peroxidu, so súčasným prídavkom plastifikátora vedie k materiálu s dobrými mechanickými vlastnosťami.

Druhým materiálom je kompozit s PCL matricou plnenou organickým plnivom, napr. drevnými časticami. V tomto prípade sa výrazne zvýši teplota mäknutia PCL (polymér samotný sa topí okolo 60 ^{o}C) a súčasne sa podstatne zníži cena výsledného produktu. Opäť kompatibilizácia zosietením je nutnou podmienkou pre dosiahnutie dobrých vlastností zmesi hydrofóbnej matrice s hydrofilným plnivom.

Tretím príkladom je nanokompozit na báze PCL matrice alebo zmesnej matrice PHB / PCL s prídavkom malého množstva plniva na báze montmorilonitu, ktoré je možné za určitých podmienok rozdispergovať v matrici na nanočastice. Stuženie PCL sa dosiahne už pri obsahu plniva pod 5 hm. %, takže sa zachová biodegradovateľnosť nanokompozitu v zmysle normy ISO 14855.

3PP3

MEDICÍNSKA CHÉMIA VO VÝVOJI NOVÝCH TYPOV KANCEROSTATÍK - INHIBÍTORY ANGIOGENÉZY

Andrej Boháč,[a] Marta Sališová,[a] Margita Lácová,[a] Gabriela Addová[b]

a/ Katedra organickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, 842 15 Bratislava,
bohac@fns.uniba.sk
b/ Chemický ústav, PRIF, Univerzita Komenského, 842 15 Bratislava

Onkologické ochorenia predstavujú vážny spoločenský problém. Každé štvrté úmrtie v rozvinutých krajinách je spôsobené rakovinou. Vývoj nových terapeutických postupov a liečiv má preto veľký význam. Porozumenie mechanizmu účinku liečiva v organizme, či štúdium vzťahov medzi štruktúrou a biologickou aktivitou je vstupom k racionálnemu hľadaniu nových nosných štruktúr *„leading structures“* - potenciálnych terapeutík. Sme svedkami toho, že nízkomolekulové napr. organické zlúčeniny sú schopné ovplyvňovať zložité biologické deje v živých organizmoch, regulovať vplyv a chovanie veľkých biomolekúl, ovplyvňovať patologické procesy. Medicínska chémia - chemicko-biologická vedná disciplína sa zaoberá uvedenými vzťahmi a je dôležitou súčasťou moderného farmaceutického výskumu.

Angiogenéza je pojem, ktorý popisuje proces novotvorby ciev z už existujúcej vaskulatúry organizmu. Novotvorba ciev u dospelého jedinca je zriedkavá a vyskytuje sa v prípade poškodenia tkaniva napr. úrazom, existuje počas menštruačného cyklu a je významná pri vývoji plodu v tele matky. Patologická angiogenéza je známa pri rôznych typoch ochorení: rakovina, makulárna degenerácia, diabetická retinopatia, reumatoidná artritída, glaukóm, psoriáza.... V dôsledku vnútornej rovnováhy sa patologická angiogenéza v zdravom organizme bežne neprejavuje. Z množstva známych endogénnych regulátorov angiogenézy je zrejmé, že tento proces je v organizme vysokou mierou regulovaný.

Prednáška prinesie prehľad o výskume a klasifikácii nízkomolekulových organických inhibítorov angiogenézy, súčasných znalostiach mechanizmu ich pôsobenia a poukáže na možné terapeutické perspektívy antiangiogénnej liečby.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu vedy a techniky na základe zmluvy č. APVT-20-031904.

3PP4

POLYMERNÍ SYSTÉMY PRO PŘÍPRAVU PROTRAHOVANÝCH A CÍLENÝCH FOREM LÉČIV

K. Ulbrich*, B. Říhová

**Ústav makromolekulární chemie AV ČR, Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6*
e-mail: ulbrich@imc.cas.cz
Mikrobiologický ústav AV ČR, Vídeňská 1083, 142 20 Praha 4

Současná medicína používá širokou škálu léčiv, které ve většině případů vyhovují požadavkům lékařů i pacientů a umožňují úspěšnou léčbu běžných i mnoha závažných onemocnění. Bohužel, v řadě případů však stále ještě nemá současná medicína dostatečně účinné léky k disposici. Jako příklad je možné uvést nádorová onemocnění a nebo onemocnění či poruchy imunitního systému. Ukazuje se, že použití vodorozpustných syntetických polymerů jako „nosičů léčiv“ může, v kombinaci s klasickými léčivy, vést nejen ke zlepšení farmakologické účinnosti takových léčiv a zvýšení komfortu spojeného s jejich užívání pacientem (léky s protrahovaným účinkem), ale především může vést k novým lékovým formám se zcela novými vlastnostmi. Spojení léčiva s polymerním nosičem vede k zásadním změnám fyzikálně-chemických a biologických vlastností léčiva. Ovlivní nejen stabilitu a rozpustnost léčiva v prostředí organizmu, ale ovlivní i prostupnost biologickými membránami a schopnost interakce s jednotlivými složkami organizmu. To vede k zásadnímu zpomalení jeho vylučování a tedy k prodloužení doby setrvání v organizmu, snížení toxicity či imunogenicity a v optimálním případě umožňuje cílené působení léčiva pouze v místě požadovaného účinku.

Systematický výzkum, prováděný ve spolupráci ÚMCH AV ČR a MBÚ AV ČR je v poslední době především zaměřen na vývoj polymerních cytostatik. Většina vyvíjených polymerních cytostatik je založena na použití vodorozpustných nosičů připravených na bázi kopolymerů N-(2-hydroxypropyl)methakrylamidu (HPMA) nebo biodegradovatelných multiblokových kopolymerů poly(ethylenglykolu) (PEG) [1]. Oba typy polymerů nesou v postranních řetězcích kovalentně vázané cytostatikum, které je v této polymerní formě neaktivní. Léčivo může být z polymeru uvolněno a tím aktivováno buď účinkem enzymů (uvnitř cílové nádorové buňky např. lysosomálními enzymy) a nebo chemickou hydrolýzou vazby použité k připojení léčiva k polymeru, a to, pokud možno, opět pouze uvnitř nádorové buňky. Tím by mělo dojít k odstranění vedlejších toxických účinků doprovázejících klasickou léčbu běžnými cytostatiky.

Specifického působení cytostatika na nádor může být dosaženo tím, že polymerní nosič je konstruován jako biodegradavatelný vysokomolekulární systém ukládající se specificky v pevných nádorech díky EPR (enhanced permeability and retention) efektu, nebo zavedením směrující struktury (často protilátky) schopné specifické interakce polymerního léčiva s receptory nádorové buňky a tímto způsobem zajišťující cílenou dopravu léčiva do těchto buněk.

Připravili jsme polymerní kancerostatika lišící se svoji strukturou a nesoucí ve své molekule cytostatikum doxorubicin (Dox) a monoklonální protilátku jako směrující skupina. Ukázali jsme, že takto připravená léčiva jsou schopna specificky interagovat a pronikat do vybraných nádorových buněčných linií a v těchto buňkách uvolnit léčivo rychlostí řídící se strukturou vazby použité pro připojení léčiva k polymeru. Při léčbě nádorů u myších modelů vykazují polymerní léčiva minimální vedlejší toxické účinky, jejich maximální tolerovaná dávka je podstatně vyšší nežli volného Dox a jejich použití vede v řadě případů k úplnému vyléčení pokusných zvířat, a to i v případě terapeutického modelu podání léčiva a několika různých nádorových linií. Navíc, u vyléčených zvířat byla pozorována značná rezistence vůči nově inokulovaným nádorům. To znamená, že polymerní cytostatika působí nejen svým výrazným cytotoxickým efektem, ale jsou šetrná k imunitnímu systému a při léčbě jej dokonce stimulují. Protinádorový účinek lidskou protilátkou (Endobulin) směrovaného polymerního konjugátu Dox byl potvrzen i u lidských pacientů s generovaným nádorem prsu [2].

Tato práce byla podporována grantem GA AV ČR (A4050201 a grantem Akademie věd ČR (S 5020101)

[1] K. Ulbrich, V. Šubr, M. Pechar, J. Strohalm, M. Jelínková, B. Říhová, *Macromol. Symp. 152*, 151-162 (2000)
[2] B. Říhová, J. Strohalm, J. Prausová, K. Kubáčková, M. Jelínková, L. Rozprimová, M. Šírová, D. Plocová, T. Etrych, V. Šubr, T. Mrkvan, M. Kovář, K. Ulbrich, *J. Controlled Rel. 91*, 1-16 (2003)

4PP1

IGNÁC ANTON BORN A PRVÝ EURÓPSKY VEDECKÝ ZJAZD CHEMIKOV A METALURGOV V SKLENÝCH TEPLICIACH V ROKU 1786

Ivan Herčko

Ústav vedy a výskumu, UMB, Národná 12, Banská Bystrica, ekomuz@fpvumb.sk

Od roku 1776 pracoval v Dvorskej komore pre banícke a mincovnícke záležitosti vynikajúci vedec **Born Ignác Anton** (1742-1791), kde ho pozvala Mária Terézia, aby tam usporiadal a popísal cisárske prírodovedné zbierky. Vo Viedni potom pokračoval vo svojich výskumných prácach, najmä v oblasti amalgamácie rúd drahých kovov a stal sa tam stredobodom vedeckých snáh. Keď sa začal zaoberať amalgamáciou zlatých rúd a obhajovať názor, že všetko rýdze, aj vrastané zlato v rude sa dá amalgamovať, zhromaždil všetky dostupné údaje o amalgamačnej metóde, najmä z Južnej Ameriky. Rudy rozomieľal na jemný prach, preosieval ich sitami, zhotovenými z ľudských vlasov a potom ich pražil s prísadou kuchynskej soli. Dôkladným experimentovaním s rôznymi typmi rúd a poloproduktov dokázal, že získavanie zlata a striebra amalgamáciou je technicky, aj ekonomicky výhodnejšie, ako pomocou ohňa, t.j. tavením.

Verejnú obhajobu vlastných výskumov začínal I. A. Born svojím listom z roku 1784, adresovanom cisárovi Jozefovi II, v ktorom navrhol zavedenie svojej metódy v rakúskych krajinách potom, keď sa dokážu jej

výhody a opodstatnenosť na základe praktických skúšok. S Bornovým návrhom panovník súhlasil a tak sa ešte v tom istom roku priviezla z Banskej Štiavnice strieborná ruda do Münzengrabenu pri Viedni, s ktorou prišiel aj skúsený tavič.

Prvú skúšku s banskoštiavnickou rudou urobil I. A. Born 3. januára 1785, ale bezúspešne. Druhá skúška sa uskutočnila 10. januára a táto už dokázala výhody novej metódy. Napriek rôznym odporcom Jozef II. nakoniec 18. apríla 1785 rozhodol, aby sa v skúškach pokračovalo vo veľkom už na Slovensku. Za miesto pokračovania v týchto skúškach si I. A. Born vybral Sklené Teplice, nakoľko tam bol vhodný objekt huty, ktorá už dlhšie nepracovala. Naviac, Sklené Teplice neboli príliš vzdialené od nálezísk striebornej rudy a pritom nemusela byť zastavená prevádzka žiadnej huty. Táto oblasť mu bola dobre známa, pretože krátky čas pôsobil v Banskej Štiavnici, kde ho 26. januára 1769 vymenovali za asesora Hlavného komorskogrófskeho úradu. I. A. Born mal snahu bane v Banskej Štiavnici technicky aj ekonomicky pozdvihnúť. Sídlila tam aj Banícka akadémia s odbornou základňou, kde mu vo verejných skúškach odborne pomáhal najmä jeho priateľ, profesor Anton Ruprecht.

Keď mu cisár Jozef II. dal súhlas, aby mohol urobiť tieto pokusy vo veľkom v Sklených Tepliciach, pozval tam v roku 1786 viacerých významných prírodovedcov, banských odborníkov a metalurgov, ktorým predvádzal pokusy s priamou amalgamáciou rúd drahých kovov. Okrem Bornových pokusov sa tu prejednávali aj iné problémy v tomto vednom odbore. Pri tejto príležitosti došlo k založeniu prvej medzinárodnej spoločnosti pre baníctvo, hutníctvo a príbuzné vedy, ktorá mala svetový význam, ale onedlho po založení zanikla. Tak sa vďaka I. A. Bornovi slovenská huta v Sklených Tepliciach stala stretnutím učených domácich a zahraničných odborníkov a dala podnet k prvému vedeckému kongresu na slovenskej pôde.

Bornove pokusy s amalgamačnou metódou na odlučovanie drahých kovov v hute v Sklených Tepliciach, ktorá predstavuje druhú etapu jeho prác na Slovensku v rokoch 1784 až 1786 mali neobyčajný význam v dejinách geológie, baníctva a hutníctva na Slovensku. Bornova amalgamačná metóda bola založená na princípe chemického rozpúšťania materských hornín, ktoré sa pred týmto procesom pražili a potom za pomoci ortuti amalgamovali. Jeho nová metóda tzv. nepriamej amalgamácie rúd umožňovala značne znížiť náklady na palivo a ortuť. Jej prínos sa týkal prípravy rúd, ich zomletia a praženia a napokon jednotlivých operácií, zodpovedajúcich miestnemu charakteru rúd. Nezanedbateľnou výhodou bolo najmä urýchlenie výrobného procesu a možnosť využitia domácej ortuti z Idrie.

Zdokonaľovanie a praktické uskutočnenie tzv. európskej amalgamácie a najmä vybudovanie nového amalgamačného zariadenia v Sklených Tepliciach je spojené s menom profesora A. Ruprechta, ktorý mal neskôr podstatnú zásluhu na tom, že sa táto metóda úspešne zaviedla do praxe a uplatnila vo vtedajších banských centrách Európy i zámoria. Bornovu metódu sám Ruprecht aj zdokonalil. Jeho zdokonalenie spočívalo vo zvýšení výťažnosti striebra, ktorú docielil jemnejším dvojstupňovým drvením a dvojitým sulfatačným pražením, pričom druhé praženie sa robilo s prísadou soli. Zlepšenie spočívalo aj v znížení potrebného množstva vody, použitej pri amalgamácii, ako aj v tom, že z vypraženého rudného prachu vytváral kašu, ktorá sa dala ľahšie amalgamovať. A. Ruprecht zaviedol amalgamáciu v medených bubnoch, ktorými nahradil dovtedy používané drevené bubny. Chemický proces pri amalgamovaní prebiehal potom tak, že vznikajúci chlorid meďnatý previedol striebro (viazané na sírniky, síroantimonitany a síroarzenitany) na chlorid strieborný, ktorý sa cementoval meďou a ortuťou na amalgamované striebro.

4PP2

PREMENA TRADIČNEJ ŠKOLY NA MODERNÚ ŠKOLU 21. STOROČIA

Beáta Brestenská

Katedra didaktiky prírodných vied, PRIF UK, Bratislava, brestenska@infovek.sk

Poznatková spoločnosť a trvale udržateľný ekonomický rozvoj spoločnosti si vyžaduje kvalitný, flexibilný a konkurencieschopný vzdelávací systém. Projekt Infovek Slovensko priniesol do našich škôl nielen nové informačné a komunikačné technológie, ale začal meniť tradičnú školu na modernú školu 21. storočia. Projekt Infovek má štyri základné piliere, ktoré sa realizujú od začiatku spolu:

- technická infraštruktúra
- príprava ľudských zdrojov
- digitálny edukačný obsah
- digitálne štúrovstvo - otvorená škola

Prvý pilier projektu sa podarilo zrealizovať k decembru 2004. Všetky základné a stredné školy na Slovensku (3482) sú dnes vybavené hardvérom a sú pripojené na internet. Na všetky školy bol dodaný digitálny edukačný obsah pre všeobecno-vzdelávacie predmety. Tým projekt Infovek vytvoril významné predpoklady, pre nastupujúce, nevyhnutné zmeny v obsahu a metódach vyučovania v modernej škole.

Kľúčom v úspešnej realizácie modernej školy je učiteľ. Preto aj študijné programy učiteľského štúdia na Univerzitách musia zohľadňovať potreby prípravy na nové kompetencie práce učiteľa v modernej škole.

Poznatková spoločnosť je založená na celoživotnom vzdelávaní. Školy nadobúdajú stále väčší význam ako centrá vzdelávania lokálnej komunity. V projekte Infovek vyrástli už mnohé školy, ktoré sa stali „Otvorenými školami“ a „Školiacimi centrami projektu Infovek“.

Dosiahnuté výsledky a konkrétne príklady premeny tradičnej školy na modernú školu budú prezentované v prednáške a sú v citovanej literatúre a na webovskej stránke www.infovek.sk.

[1] Kol.: *Zborník príspevkov z 2. celoštátnej konferencie Infovek,* Stará Turá, 352 s., (2001)
[2] Kol.: *Zborník príspevkov z 3. celoštátnej konferencie Infovek,* Modra-Harmónia, 284 s., (2002)
[3] Kol.: *Zborník príspevkov z 4. celoštátnej konferencie Infovek,* Spišská Nová Ves, 524 s., (2003)

4PP3

KONCEPCE CHEMICKÉHO EUROBAKALÁŘE

Pavel Drašar[a], Milan Kodíček[a], Stanislav Labík[a], Marta Sališová[b], Terry N. Mitchell[c]

[a]VŠCHT Praha, 166 28 Praha 6, ČR, Pavel.Drasar@vscht.cz;
[b]PrF UK, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, SR, salisova@fns.uniba.sk;
[c]Fachbereich Chemie, Universität Dortmund, Germany, mitchell@eurobachelor.net

Nutnost začlenit studium chemie do souvislosti evropských strukturálních změn naznačených Boloňskou deklarací je mimo diskusi. Definice a požadavky akreditačního postupu jsou publikovány v nejaktuálnější podobě tzv. „Chemistry Eurobachelor Label Committee (CEB LC)“[1]. Akreditační postup požaduje, aby studium splňovalo náročná kritéria (např. většinu studijního úsilí zaměřeného na chemii a příbuzné obory) a evropské atributy (m.j. dodatek diplomu, kreditní systém a známkování podle ECTS). Školy, které vstoupí do systému eurobakaláře, přijmou m.j. závazek uznat eurobakalářskou kvalifikaci ostatních škol, které byly akreditovány CEB LC, umožnit pasivní i aktivní mobilitu studentů v bakalářském studiu i po něm, zkvalitnit komunikační vazby mezi učiteli a studenty a pravidelně hodnotit jak účinnost pedagogického procesu, tak úroveň jeho zátěže na studenty. Studijní plán je konstruován na základě požadavku normy [1], která používá jak Dublinské, tak Budapešťské deskriptory, popisující úroveň absolventa studia chemického eurobakaláře. Tím, že se chemici svojí Drážďanskou deklarací přihlásili k Boloňskému procesu [2], se evropská chemická obec stala stabilním pilířem zdokonalování a harmonizace vzdělávání v chemii na třetím stupni. Kvalita tohoto procesu je pod stálým dohledem ECTN a jeho Asociace, EuCheMS (dříve FECS), projektu „Tuning Educational Structures in Europe“ a CEB LC. Tyto a další organizace spolu na nejrůznějších úrovních účinně spolupracují v rámci zdokonalování studia chemie v Evropském prostoru [3].

V ČR je VŠCHT Praha první vysoká škola, která usiluje o vstup do eurobakalářského systému; zavázala se podat přihlášku do 30. září 2005.

Projekt byl podpořen v roce 2005 grantem rozvojového programu MŠMT ČR č. 605.

[1] Mitchell T. N., Whewell R. J., *The Chemistry „Eurobachelor“*, Version 2005, publikováno na http://www.cpe.fr/ectn-assoc/eurobachelor/srvc/zreports.htm
[2] Drašar P., Chem. Listy, 98, 441-443 (2004).
[3] Gros L., Zeller W., Moravcová J., *Chem. Listy, 99*, 63 (2005).

4PP4

POZITÍVNE A NEGATÍVNE TRENDY V CHEMICKOM VZDELÁVANÍ

Ján Garaj

Trenčianska univerzita Alexandra Dubčeka, Študentská 2, 911 50 Trenčín,
e-mail: garaj@tnuni.sk

Za ostatných pätnásť rokov došlo v riadení, organizácii a v postavení vysokých škôl v SR k podstatným zmenám. Zmeny sú legálne a odpovedajú platnej legislatíve. Sú to najmä:

1) Riadenie školy a fakúlt, vrátane voľby jej funkcionárov je v rukách vysokej školy. Minister školstva, resp. prezident Republiky posudzuje návrh na rektora len z občiansko-etických hľadísk.
2) Vysoká škola má právo vytvárať svoju vnútornú štruktúru, vrátane fakúlt. Akreditačná komisia vlády SR posudzuje vznik novej fakulty len podľa personálnych predpokladov a materiálneho zabezpečenia a nie podľa potreby.
3) Civilná vysoká škola má štatút verejno-prospešnej organizácie a podľa zákona č. 132/2002 Zb.z. o vysokých školách je vlastne podnikateľským subjektom so všetkými kladmi a nedostatkami, ktoré z takého štatútu vyplývajú.
4) Finančné zabezpečenie verejno-prospešnej vysokej školy spočíva na troch pilieroch, z ktorých jeden vychádza od daňových poplatníkov a tvorí ho štátna dotácia založená na počte študentov a povahe študijných odborov.
5) Nová univerzita, resp. vysoká škola vzniká z vôle alebo aspoň z podnetu politickej strany, resp. miestnej samosprávy.

Dôsledkom vyššie uvedených mechanizmov došlo k vzniku 8 nových vysokých škôl a celého radu nových fakúlt, ktorých počet sa v súčasnosti blíži k stovke. Okrem toho vznikol celý rad detašovaných pracovísk externého štúdia, organizovaných súkromnými subjektmi. S týmto extenzívnym rozvojom je v rozpore demografický vývoj. Dnes je známe, že v budúcich desiatich rokoch dôjde k poklesu absolventov stredných škôl o 63%, v porovnaní so súčasným počtom absolventov. K demografickému poklesu už dochádza.

Orientáciu mládeže na vysoké školy má vyriešiť trh. Dôsledkom je 17 ekonomických fakúlt v SR, (ich počet neustále rastie), malý záujem absolventov stredných škôl o štúdium na technických smeroch a na druhej strane enormný záujem mládeže o spoločensko-vedné a lekárske odbory, vedený víziou dobrého uplatnenia.

To je všeobecný rámec, z ktorého vyplývajú klady i nedostatky pre vysoké školy všeobecne. Chemické odbory vysokých škôl ovplyvňujú navyše aj ďalšie faktory. Pozitívom je predovšetkým vysoká pedagogicko-vedecká kvalifikácia zavedených chemických a prírodovedeckých fakúlt, ich schopnosť presadzovať sa v zahraničných aktivitách a aj relatívne dobrá experimentálna základňa. Prekážkami pri získavaní študentov na chemické, resp. chemicko-technologické odbory je často skreslené

spoločenské vedomie, že chémia je zodpovedná za zhoršujúce sa životné prostredie. V neposlednom rade prekážkou je aj ťažké štúdium, bez garancie vysokých zárobkov po ukončení školy.

Názory na riešenie a východiská pre chemicky zamerané fakulty, resp. vysoké školy bude predmetom prednášky.

5PP1

TOXINOGÉNNE HUBY A MYKOTOXÍNY V ŽIVOTNOM PROSTREDÍ

Daniela Hudecová

Katedra biochémie a mikrobiológie,
Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU,
Radlinského 9, 812 37 Bratislava,
e-mail: daniela.hudecova@stuba.sk

Mikroskopické mycéliové huby plnia v prírode nezastupiteľnú úlohu deštruentov pri rozklade odumretej organickej hmoty rastlinného alebo živočíšneho pôvodu. Niektoré sú využívané v potravinárskom priemysle pri výrobe syrov, kyseliny citrónovej, kojovej, vo farmaceutickom priemysle pri výrobe antibiotík a iných liečiv, v poľnohospodárstve ako biopesticídy proti hmyzu a fytopatogénnym mikromycétam. Negatívne pôsobenie húb sa prejavuje vo viacerých oblastiach. Sú pôvodcami mykotických ochorení, môžu byť príčinou alergických ťažkostí u citlivých jedincov vdychovaním nadmerného množstva spór alebo prchavých látok produkovaných hubami. Napádajú viaceré poľnohospodárske plodiny, produkujú v priebehu vegetácie do nich nízkomolekulové produkty sekundárneho metabolizmu - mykotoxíny, osídľujú a degradujú potravinárske suroviny, potraviny a krmivá a pri nevhodnom uskladnení produkujú do substrátu mykotoxíny.

Produkciu mykotoxínov v prostredí ovplyvňujú viaceré faktory: prítomnosť toxinogénnej huby, vhodný substrát pre jej rast, prostredie vhodné na produkciu toxínov. Hoci identifikácia kontaminujúcej huby môže mať diagnostický význam v prípade mykotoxikózy, definitívny záver sa robí až po identifikácii špecifického toxínu. Prítomnosť samotnej huby nie je dôkazom, že produkovala toxín; toxín môže pretrvávať v substráte, hoci producent sa tu už nevyskytuje; toxín môžu produkovať rozdielne rody húb. Prítomnosť toxinogénnej huby je však určitou indikáciu potenciálneho rizika. Po chemickej stránke mykotoxíny predstavujú heterogénnu skupinu, sú to najmä deriváty furánu, pyránu, laktónov, chinónov, cyklické dipeptidy a polypeptidy. Výskyt toxinogénnych húb v potravinových reťazcoch predstavuje potenciálne až aktuálne zdravotné riziko, keďže mykotoxíny sú známe akútnymi a chronickými účinkami na zvierací a ľudský organizmus. Vyvolávajú výrazné poškodenie pečene a obličiek (aj nádorové), pôsobia ako neurotoxíny a myotoxíny, dermatotoxíny, majú imunosupresívne, tremorgénne, mutagénne, teratogénne a karcinogénne účinky, u zvierat sú známe ich estrogénne účinky.

Na detekciu a identifikáciu mykotoxínov sa využívajú metódy HPLC, TLC, ELISA. Prítomnosť fusáriových mykotoxínov (deoxynivalenol - DON, T-2 toxín, zearalenón, fumonizíny alebo ochratoxín) a aflatoxínov B_1, B_2, G_1, G_2 sa sleduje v obilninách i krmivách, aflatoxín M v mlieku a v mliečnych výrobkoch. Pozornosť je venovaná možnému výskytu aflatoxínov v dovážaných produktoch (oriešky, orechy, koreniny..). Pozvoľná a dlhodobá akumulácia mykotoxínov v bunkách a tkanivách konzumenta predstavuje potenciálne nebezpečenstvo, keďže mnohé mykotoxíny sú vysoko termorezistentné a nepodliehajú tepelnej deštrukcii ani pri razantných technologických či kulinárskych úpravách potravinárskej suroviny.

5PP2

CYKLOTRÓNOVÉ IÓNOVÉ ZVÄZKY IN VITRO A IN VIVO

Fedor Macášek

BIONT, a.s., Karloveská 63, SK-842 29 Bratislava,
e-mail: macasek@biont.sk

Diskutujú sa hlavné smery využitia vysokoenergetických iónových zväzkov:

1. fyzikálno-chemická modifikácia materiálov,
2. radiačno-biologické účinky (terapia nádorov zväzkami protónov a ťažkých iónov),
3. mikroskopická analýza povrchov tuhých látok na základe indukovaného, sekundárneho žiarenia,
4. produkcia neutrónov (aktivačná analýza podľa promptného žiarenia gama a pod.),
5. produkcia rádionuklidov.

Rádiochemická príprava rádionuklidov je východiskom pre syntézy označených zlúčenín a rádioaktívnych liekov (rádiofarmák) pričom treba sledovať trend zvyšovania špecifickosti označených molekúl na báze molekulovej biológie, prechod na rádiofarmaká tretej a vyššej generácie pre tomografie PET [1] a SPECT [2].

Šanca pre Slovensko zaviesť urýchľovačové techniky do praxe vznikla uznesením vlády SR v roku 1996 o strategickom zámere vybudovať z prostriedkov deblokácie dlhu Ruskej federácie voči SR Cyklotrónové laboratórium v rámci Slovenského metrologického ústavu v Bratislave. Tento projekt prešiel ďalšími úpravami a schválili ho ďalšie vlády tak, že projekt Cyklotrónového centra SR obsiahol dva cyklotróny: jeden na energie protónov 72 MeV konštruovaný v Spojenom ústave pre jadrovú fyziku v Dubne, RF (DC-72) a jeden na urýchľovanie protónov do energií 18 MeV zakúpený u belgickej firmy IBA (Cyclon 18/9).

Pracovisko DC-72 bude centrálnou zložkou pavilónu „J“. Predmetom jeho činnosti bude produkcia a rozvod zväzkov pre pracovisko výroby SPECT a terapeutických rádiofarmák, pracovisko hadrónovej terapie, a pre laboratóriá fyzikálnych a metrologických výskumov a aplikácií. Perspektívne sú aplikácie veľkoplošného ožarovania polymérových fólií, modifikácie materiálov a analýzy využívajúce metódu TOF, ako aj ďalšie detekčné a spektrometrické systémy.

Pracoviská pre výrobu SPECT a terapeutických rádiofarmák sa budú zaoberať najmä výrobou halogénovaných

rádiofarmák (jódu-123, fluóru-18 a astátu-211). Výrobné a vývojové laboratóriá budú vybavené terčom pre prípravu vysoko čistého jódu 123I, modulmi pre sterilnú výrobu najmenej 4 druhov rádiofarmák novej generácie (označené peptidy, ligandy peptidových receptorov a pod.). Biochemické alfa laboratórium je plánované pre prípravu terapeutických rádiofarmák alfa žiaričov (211At resp. 149Tb) na báze monoklonálnych protilátok, ktoré môžu dopraviť alfa žiarič presne do chorej bunky (rádioimunoterapia). Vhodné charakteristiky rádioaktívnej premeny na terapiu má aj 123I, ktorý sa inak využíva v SPECT diagnostike.

V PET centre spoločnosti BIONT vyprodukuje cyklotrón Cyclon 18/9 s intenzitou zväzku protónov 40 ĶA a energiou 18 MeV za 2 hodiny až 160 GBq fluóru-18, z ktorého sa môže vyrobiť približne 100 GBq rádiofarmaka [18F]FDG a s tým možno zabezpečiť prevádzku 5-10 PET tomografov v okruhu do 200 km. S výrobou tohto rádiofarmaka sa začalo na základe zmluvy s ÚJF AVČR v Řeži. Vlastné diagnostické pracovisko nukleárnej medicíny vybavené kombinovanými PET/CT a SPECT/CT tomografmi má kapacitu niekoľko desiatok PET a SPECT diagnostických vyšetrení denne. V spolupráci s Medzinárodnou agentúrou pre atómovú energiu sa začalo riešenie úlohy vedecko-technickej spolupráce pri príprave nových PET rádionuklidov, komplementárnych rádionuklidom pre SPECT tomografiu. V rámci 6.FW EÚ v rokoch 2006-9 má byť spoločnosť BIONT a.s. koordinátorom subprojektu riadenia kvality aplikácií cyklotrónových technológií a zúčastnená v ďalších ôsmich subprojektoch 18 európskych cyklotrónových centier.

[1] www.fns.uniba.sk/~kjd/články:Cyklotrón
[2] www.biont.sk

5PP3

THE ROLE OF SIGMA FACTORS OF RNA POLYMERASE IN STRESS RESPONSE, PATHOGENICITY AND DIFFERENTIATION OF BACTERIA

Ján Kormanec

Institute of Molecular Biology, Centre of Excellence for Molecular Medicine, Slovak Academy of Sciences, Dubravska cesta 21, 845 51 Bratislava, Slovak Republic, e-mail: jan.kormanec@savba.sk

In their natural habitats, bacteria are exposed to various stresses that elicit production of so-called general stress response proteins, having protective function under stress. The responses to these stresses are mediated by alternative sigma factors of RNA polymerase. These sigma subunits, after binding catalytically competent RNA polymerase core enzyme, confer specific recognition and initiation of transcription of cognate promoters, ensuring simultaneous expression of the whole sets of genes, so-called regulon of the particular sigma factor. Thus, RNA polymerase holoenzyme containing a particular stress-response sigma factor governs expression of whole set of genes encoding the proteins essential for overcoming these adverse conditions.

In genetically best-characterized representative of Gram-negative bacteria, *Escherichia coli*, the general stress response is governed by group 2 sigma factor σ^S. Moreover, there are two additional sigma factors governing expression of the genes essential to cope with the intracellular heat shock response (σ^H) and extracytoplasmic stress response (σ^E). The homologue of the extracytoplasmatic stress response sigma factor σ^E has been shown to be critical to virulence of the close pathogenic bacterium Salmonella *typhimurium*. Thus, the genes of the σ^E regulon should also play a role in the pathogenicity of this bacterium and identification the σ^E regulon may reveal new genes involved in the virulence and survival of S. *typhimurium* in the host. To identify the genes of the S. *typhimurium* σ^E regulon, we optimized the previously established E. *coli* two-plasmid system. We identified 63 genes belonging to the regulon. The identified genes code for proteins involved in primary metabolism, lipopolysaccharide and phospholipid biogenesis, regulatory proteins, periplasmic proteases and folding factors, proposed lipoproteins, inner and outer membrane proteins, and proteins with unknown function. The expression of the genes was directed by the promoters containing sequences highly similar to the consensus sequence of σ^E-dependent promoters in E. *coli*.

In contrast to E. *coli*, in Gram-positive *Bacillus subtilis* and related bacteria, the general stress response is governed by the group 3 alternative sigma factor σ^B. Interestingly, its homologue in B. *subtilis*, σ^F, governs another pathway responding to growth-limiting conditions, sporulation. Thus, in B. *subtilis* there is interplay between two different response systems and depending upon inputs, B. *subtilis* cell have to decide to go into reversible process of general stress response governed by σ^B, or irreversible process of morphological differentiation, sporulation, governed by σ^F and following cascade of other sigma factors. The alternative sigma factors homologous to B. *subtilis* σ^B have also been found to have a role in pathogenicity in other Gram-positive bacteria, including pathogenic *Staphylococcus aureus*. Therefore, like in previous case, to identify the genes of the *S. aureus* σ^B regulon, we optimized the *E. coli* two-plasmid system for identification of *Staphylococcus aureus* promoters that are recognized by the general stress response sigma factor σ^B. The promoters governed expression of genes encoding proteins involved in various cellular functions, including the virulence-associated *clfA* gene for fibrinogen-binding clumping factor.

In contrast to *B. subtilis*, we have shown that stress response and development is connected in *Streptomyces*. These Gram-positive soil bacteria undergo an exceptional process of morphological differentiation that is regulatory connected with production of huge amount of secondary metabolites, including 55% known antibiotics. Interestingly, *S. coelicolor* harbours 9 close homologues of *B. subtilis* σ^B. Several of them were characterized and shown to have a role in differentiation, in addition to stress response. Interestingly, two of them have been shown to have a dual role in *S. coelicolor* in regulation of osmotic response and in morphological differentiation. Thus, in *Streptomyces*, in contract to *B. subtilis*, the process of differentiation is connected with the response to salt-stress.

5PP4

VYUŽITÍ FYZIKÁLNĚ-CHEMICKÝCH METOD PRI SLEDOVÁNÍ KVALITY ČOKOLÁDOVÝCH A NEČOKOLÁDOVÝCH CUKROVINEK

Jana Čopíková

Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 3, 166 28 Praha 6, Česká republika, e-mail: copikovj@vscht.cz

Kvalita a zejména senzorické vlastnosti cukrovinek jsou dány jejich fyzikálně-chemickými vlastnostmi. Nejenom chemické složení, ale také fyzikální stav složek cukrovinek mají svůj důležitý význam. Pouze využitím fyzikálních metod je možno vysvětlit řadu důležitých vlastností cukrovinek, které mají zásadní význam pro jejich kvalitu a trvanlivost.

Kvalitu čokolády ovlivňuje její receptura, to znamená složení, velikost jednotlivých částic a krystalická forma kakaového másla, případně podíl krystalické fáze a tekuté fáze, která je tvořena roztaveným kakaovým máslem. Nukleární magnetickou resonancí se stanovuje typ náhrady kakaového másla nebo obsah kakaového másla v čokoládách, diferenciální skenovací kalorimetrie nebo rentgenová difrakce pomáhá odhalit potíže s krystalizací kakaového másla v požadované krystalické formě

Nečokoládové cukrovinky jsou amorfní, jako například kandyty, želé a některé typy karamel, nebo krystalické, jako například fondán, marcipán a další typy karamel. Kromě složení se na jejich kvalitě a trvanlivosti podílí poměr jednotlivých fází, krystalické, amorfní a kapalné. Základní informace o struktuře cukrovinek nečokoládových poskytuje polarizační mikroskopie. Diferenciální skenovací kalorimetrie se uplatňuje při určení teploty skelného přechodu kandytů, to znamená zhroucení cukrovinky, a přítomnosti nebo obsahu nežádoucích krystalů.

V zásadě je možné shrnout, že fyzikální metody jsou nezastupitelné při sledování kvality cukrovinek a pomáhají řešit problémy, které se objevují během technologie.

6PP1

ASPEKTY ROZVOJA VLÁKNITÝCH MATERIÁLOV VO SVETE A U NÁS

Budzák D.,[a] Jambrich M.[b]

[a]*Výskumný ústav chemických vlákien, a.s. Svit, Štúrová 2, 059 21 Svit, Slovensko budzak@vuchv.sk*
[b]*Fakulta priemyselných technológií, TnU AD, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov, Slovensko mjambrich@post.sk*

Príspevok je zameraný na informáciu o rozvoji výroby a spotreby vláknitých materiálov v predchádzajúcom období, v súčasnosti a rozvojové smery v ďalšom období vo svete a názory na rozvoj u nás. Dôležitým faktorom je vhodný systém riadenia výskumu vývoja a spoločenskej praxe.

Spotreba a výroba vlákien a vláknitých materiálov prechádzali rôznymi stupňami vývoja. Dejiny vlákien a vláknitých materiálov sú rovnako staré ako dejiny civilizácie ľudstva. Začiatky spotreby vláknitých materiálov sa opierali o prírodné vlákna. Koncom 19. a začiatkom 20. storočia sa začína výroba a spotreba chemických vlákien. Prudký rozvoj spotreby chemických vlákien nastal po roku 1950 i takých chemických zložení, ktoré sa v prírode nenachádzali. Chemické vlákna sú teda legitímnym dieťaťom 20.storočia. Spotreba vlákien bola v roku 1900 2,4 kg/osobu, v roku 1950 3,8 kg/osobu, v roku 1990 7,8 kg/osobu a v roku 2003 viac ako 9 kg/osobu. Celková výroba prírodných a chemických vlákien v roku 2004 prekročila hranicu 64,000 mil. t/r aplikovaných v oblasti odievania, bytového textilu a technických textílií. Podiel chemických vlákien je cca 60%.

Z doterajších štúdií rozvoja vláknitých materiálov v predchádzajúcom období, súčasnosti a tendencií VaV môžeme uvažovať o rozvojových smeroch vo svete a u nás:

- rozvoj nových sortimentov technických vlákien, technických textílií na báze chemických a hutníckych vlákien (aplikácia - doprava, automobilový priemysel, ochrana životného prostredia, pôdohospodárstvo, stavebníctvo, zdravotníctvo) i pre kompozity - konštrukčné materiály
- rozvoj nových vláknitých materiálov na báze domácich obnoviteľných surovín pre rozvoj biodegradovateľných vláknitých materiálov z biopolymérov
- optimalizácia procesov prípravy vláknitých materiálov s cieľom zníženia energetickej náročnosti a minimalizácie odpadov
- riešenie progresívnych technológií výroby - nanotechnológie vláknitých materiálov na báze nových a modifikovaných polymérov, špeciálnych a multifunkčných vlákien pre inteligentné a technické textílie (High - Tech)
- vývoj PO vlákien z metalocenových polymérov vlákien hlavne pre technické textílie s vyššími úžitkovými vlastnosťami
- inovácia zariadenia pre prípravu technických vlákien s využitím vlastných konštrukčných a výrobných kapacít
- rozšírenie výroby netkaných vláknitých materiálov z PO (PP, PE), PES a špeciálnych polymérov pre aplikáciu v technických textíliách na ochranu človeka a životného prostredia

- vývoj viackomponentných a hybridných vláknitých materiálov (integrované textílie) s dobrými fyziologickými vlastnosťami, s rozmerovou stabilitou, vysokou chemickou a zvukovo - teplotnou odolnosťou pre aplikáciu v technických textíliách

6PP2

NĚKOLIK POZNÁMEK K VÝVOJI CHEMICKO-TECHNOLOGICKÝCH PROCESŮ

Josef Pašek

Ústav organické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6

V českém, slovenském a v zahraničním chemickém průmyslu bylo realizováno asi 30 procesů, u kterých se mohu považovat za hlavního autora. Budu diskutovat některé své zkušenosti.

Aplikace teorie

Vývoj procesu vyžaduje předvídání chování systémů a bez teorie nelze předvídat. I když se bez empirie úplně neobejdeme, vyloženě empirický vývoj procesu je nepřijatelný.

Význam simulačních programů

Simulační programy jako Aspen Plus, ChemCad apod. umožňují studium chování procesu i chování jednotlivých aparátů. Představují největší pokrok ve vývoji procesů. Simulační program však nenahradí hluboké porozumění zákonitostem systému. Je třeba si též uvědomit, že i univerzální programy mají chybné údaje v databázi a v několika případech jsme objevili chyby i v použitých vztazích.

Práci s univerzálním programem považuji za nejlepší výuku studentů chemické technologie a procesního inženýrství.

Je vývoj procesu tvůrčí prací?

Úroveň teoretického tvůrčího myšlení je při vývoji procesu někdy vyšší než v mnoha publikacích. Bohužel know-how se nemohou publikovat. Zdá se mi, že váha tohoto typu práce je při hodnocení vysokoškolských učitelů nepřiměřeně nízká.

6PP3

PERSPEKTÍVY VYUŽITIA VÝSKUMU V CHÉMII

Milan Králik

VÚCHT a.s. Nobelova 34, 836 03 Bratislava
c/o
Katedra organickej technológie, Slovenská technická univerzita, Radlinského 9, 81237 Bratislava

Za ostatných 50 rokov bol vývoj chémie a chemického priemyslu na Slovensku veľmi búrlivý. Počnúc rozšírením, resp. založením nových chemických podnikov od polovice minulého storočia, cez reštrukturalizáciu v dôsledku privatizácie a následných zmien vlastníckych vzťahov koncom storočia, a na začiatku tohto storočia, až po začatie stabilizovania v ostatných rokoch. Pri tomto stabilizovaní a ďalšom rozvoji musí slovenská chémia rešpektovať pravidlá a problémy svetového spoločenstva, od akceptovania tézy o udržateľnom rozvoji, pri znižovaní zásob fosílnych uhlíkatých surovín, resp. celkového znižovania zásob nerastných surovín, až po problém zvyšovania počtu obyvateľov, a zvyšujúce sa nároky na komfort života. Vzhľadom na tradíciu slovenskej chémie a potreby na začiatku 21. storočia by sa ako hlavné oblasti výskumu v chémii mohli uvažovať nasledovné oblasti:

a) alternatívne zdroje energie, najmä z biomasy, intenzifikácia postupov výroby bioetanolu, jeho využitie na komplexnejšie zložky palív, estery prírodných olejov, anaeróbne postupy produkcie uhľovodíkov a pod.,
b) pri znižovaní zásob ropy, komplexnejšie a efektívnejšie využitie uhlia,
c) nové, najmä kompozitné, polymérne materiály, širšie využívanie nanočastíc pri ich formulovaní, taktiež nové kovové materiály na báze zliatin a kompozitov,
d) intenzívnejšie využitie prírodných obnoviteľných zdrojov, ako surovín pre nové materiály, napr. škrob,
e) chemické procesy s vyššou selektivitou, zvyšovanie tzv. „atom utilization“ faktora, znižovanie záťaže životného prostredia,
f) vývoj nových, účinnejších a menej organizmus zaťažujúcich, liečiv, v tejto súvislosti: enantioselektívne syntézy,
g) cielenejší návrh, resp. využívanie existujúcich, katalyzátorov,
h) veľký dôraz na biotechnologické postupy a enzýmovú, resp. "enzyme-like" katalýzu,
i) návrh a riadenie technologických procesov na základe precíznejšieho opisu dejov, ktoré vo vnútri prebiehajú, rešpektovanie tzv. skutočnej chemickej kinetiky a transportných dejov (látka, teplo), v tejto súvislosti ďalší rozvoj a využitie prístupov s modelovaním dynamiky toku tekutín.

Nutnou podmienkou úspešnosti výskumu je interdisciplinárnosť, a v tomto smere má veľké rezervy nielen výskum všeobecne, ale aj súčasný školský systém, vrátane prípravy nových vedeckých pracovníkov.

V rámci prednášky budú prezentované viaceré konkrétne výsledky, ktoré dosiahol VUCHT a.s. aj vďaka spolupráci s univerzitnými a akademickými inštitúciami, a zámery do budúcnosti.

1P01

PRODUKCIA OXIDU UHLIČITÉHO V OSCILAČNEJ BELOUSOV - ŽABOTINSKÉHO REAKCII S KYSELINOU OXÁLOVOU

Peter Ševčík, Daniel Mišicák, Ľubica Adamčíková

Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, 842 15 Bratislava, e-mail:sevcik@fns.uniba.sk

Kyselina oxálová je najjednoduchší organický substrát oscilačnej Belousov-Žabotinského (BZ) reakcie. Ak sa použijú ceričité ióny ako katalyzátor, možno oscilácie pozorovať v 1 M H_2SO_4 za predpokladu kontinuálneho odstraňovania vznikajúceho molekulárneho brómu. V 3 M H_2SO_4 sa našli oscilácie Pt redox potenciálu za použitia Mn(II) katalyzátora aj v uzatvorenom BZ systéme, v ktorom bifurkačným parametrom bola rýchlosť miešania reakčného roztoku.

Nedávno bola opísaná metóda merania vývoja plynného CO_2 v BZ oscilačnej reakcii s kyselinou oxálovou [1]. Plynným dusíkom ako inertným plynom sa kontinuálne prebublával reakčný roztok a tvoriaci sa CO_2, odstraňovaný z reakčného roztoku, sa miešal s plynným vodíkom. Pomocou katalyzátora z niklu sa CO_2 previedol na metán, ktorého koncentrácia sa určovala v plynnej zmesi plameňovo ionizačným detektorom (FID). Oscilácie v zaznamenanom FID signále bolo možné pozorovať len pre vhodné hodnoty riadiacich parametrov, medzi ktorými bola aj prietoková rýchlosť dusíka.

V tejto práci sa opisuje nová, jednoduchšia, volumetrická metóda, ktorá sa použila na monitorovanie vývoja plynného CO_2 počas BZ reakcie s kyselinou oxálovou. Táto metóda je podobná metóde na sledovanie oscilačnej produkcie plynného kyslíka v Bray-Liebhafského a Briggs-Rauscherovej oscilačnej reakcii [2], [3]. Avšak do úvahy sa berie rozdielna rozpustnosť CO_2 vo vodných roztokoch a rozdielne hodnoty kritickej supersaturácie v roztokoch CO_2 v porovnaní s kyslíkom.

Oscilácie Pt redox elektródy sa namerali pri pomalom miešaní reakčného roztoku aj bez prebublávania inertným plynom, ale vývoj plynného oxidu uhličitého bol monotónny, neoscilačný, autokatalytický pri pomalom aj rýchlom miešaní. Diskutujú sa možné vysvetlenia takéhoto chovania.

Táto práca bola podporená grantom VEGA MŠ SR č. 1/0050/03.

[1] Pelle, K., Wittmann, M., Lovrics, K., Noszticzius, Z., Turco-Liveri, M. L., Lombardo, R., *J. Phys. Chem. A, 108*, 5377 (2004).
[2] Ševčík, P., Kissimonová, K., Adamčíková, Ľ., *J. Phys. Chem. A*, 104, 3958 (2000).
[3] Ševčík, P., Kissimonová, K., Adamčíková, Ľ., *J. Phys. Chem. A*, 107, 1290 (2003).

1P02

VYUŽITÍ VOLTAMETRIE KE SLEDOVÁNÍ METABOLISMU CYSTEINU V LIDSKÉM ORGANISMU

Tomáš Navrátil [a], Zdeňka Šenholdová [b], Kamila Přistoupilová [c], Tomáš Ivan Přistoupil [c], Michael Heyrovský [a]

[a] *Ústav fyzikální chemie Jaroslava Heyrovského, Akademie věd ČR, Dolejškova 3, 182 23 Praha 8, Česká republika*
[b] *Klinika nemocí z povolání 1. LF UK a VFN, Na Bojišti 1, 128 00 Praha 2, Česká republika*
[c] *Na Hřebenkách 19, 150 00 Prague 5, Česká republika*

Voltametrická metoda stanovení kyseliny thiodiglykolové (TDGA) v moči [1] poskytuje nové informace o metabolismu thiolátek v lidském organismu. Thiolátky jsou nezbytnou součástí biochemických pochodů spojených s buněčným dýcháním a tvorbou energie [2-3]. Jejich účast v dynamicky probíhajících pochodech lze jen obtížně sledovat, neboť se zúčastňují enzymových pochodů v katalytických množstvích. TDGA se objevuje v moči ve stanovitelné koncentraci při porušení rovnováhy mezi jejím vznikem a přeměnou na další metabolity. TDGA je meziproduktem dráhy, na jejímž začátku je aminokyselina cystein. Polovina cysteinu pochází z potravy a je transportována přes buněčné membrány ve vazbě s acetátem jako karboxymethylcystein (CMC). Druhá polovina cysteinu pochází z nitrobuněčného homocysteinu, který se uvolňuje z methioninu při transmethylaci. Methionin, aby pokryl všechny požadavky v metabolických drahách, musí být opakovaně vytvářen z homocysteinu remethylací. Děje se to tak, že je k homocysteinu stále přidávána prostřednictvím vitaminu B12 nová methylová skupina vytvořená vitaminem kyselinou listovou. Jedná se o složitý pochod, který propojuje buněčné dýchání s tvorbou energie. Porušení této koordinace se projevuje vyplavením TDGA do moči. Metabolická dráha od CMC po TDGA podléhá dennímu rytmu. Tento rytmus je určován, nabídkou substrátu, zásobením tkání kyslíkem a koncentrací uvolňovaných H^+ a e.

Poděkování projektu MPO ČR 1H-PK/42, VZ MSM 0021620807.

[1] Dlasková Z., Navrátil T., Heyrovský M., Pelclová D., Novotný L., *Anal. Bioanal. Chem., 375*, 164-168 (2003).
[2] Navrátil T., Šenholdová-Dlasková Z., Heyrovský M., Přistoupilová K., Přistoupil T.I., *Anal. Lett., 37* (06), 1093-1102 (2004).
[3] Přistoupilová K. , Přistoupil T. I., Navrátil T., Šenholdová Z., Heyrovský M., Pelclová D., *Anal. Lett., 38*(4), 613-629 (2005).

1P03

MODELOVANIE DYNAMIKY PUFROVANIA Ca^{2+} IÓNOV V DYÁDE BUNKY SRDCOVÉHO SVALU

Ivan Valent[a], Alexandra Zahradníková[b], Ivan Zahradník[b]

[a]*Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie Prírodovedeckej fakulty Univerzity Komenského, Mlynská dolina CH1-310, 842 15 Bratislava, SR, e-mail: valent@fns.uniba.sk,*
[b]*Ústav molekulárnej fyziológie a genetiky SAV, Vlárska 5, 833 34 Bratislava, SR*

Súčasná postgenómová éra biologických vied je charakterizovaná výrazným prechodom od kvalitatívneho ku kvantitatívnemu popisu skúmaných javov. Pri spracovaní a interpretácii nahromadeného množstva experimentálnych dát hrajú čoraz významnejšiu úlohu počítačové modely vychádzajúce zo základných fyzikálno-chemických princípov.

V predchádzajúcich prácach [1, 2] sme vytvorili model dyadickej štrbiny - vnútorného mikrokompártmentu srdcovej bunky kľúčového pri prenose elektrickej excitácie na svalovú kontrakciu prostredníctvom Ca^{2+} iónov (vápniková signalizácia). Tento priestor sme modelovali ako kváder (240 x 240 x 15 nm), ktorého vrchná stena predstavovala bunkovú membránu (sarkolemu) s nízko- a vysoko-afinitnými (LA, HA) väzbovými miestami pre Ca^{2+}. Pri simulovaní väzby vápnika na membránu sme použili aproximáciu stacionárneho stavu. Spodná stena zodpovedala membráne sarkoplazmatického retikula (SR) a bola rovnomerne pokrytá 49 bodovými zdrojmi Ca^{2+} iónov (kanály RyR) s prúdom 0,36 pA na kanál. Vo vnútri kvádrovej domény sme pomocou numerického solvera VLUGR3 riešili sústavu parciálnych diferenciálnych rovníc opisujúcich reakčno-difúzny systém Ca^{2+}, Mg^{2+}, ATP a CaATP.

Existujúci numerický model sme doplnili o možnosť sledovať rozdelenie Ca^{2+} iónov medzi rôzne vápnikové pufre (LA, HA, ATP) počas toku vápnika zo SR do dyadického priestoru. Výsledky simulácií ukázali, že najmä fixné vápnikové pufre na sarkoleme zohrávajú dôležitú úlohu pri stabilizácii vápnikového signálu. Voľné Ca^{2+} ióny dosahujú maximálny podiel ~20% všetkého vápnika v dyáde v čase ~500 ns od spustenia toku. Počas pseudostacionárnej fázy (10^{-3} - 10^{-2} ms) je prevažná časť vápnika (70 - 80 %) viazaná na HA-väzbové miesta. Po ich saturácii ich vystriedajú LA-väzbové miesta, ktoré viažu ~80% Ca počas stacionárnej fázy (od 1 ms) až do zastavenia toku v čase 10 ms. Množstvo vápnika viazaného na ATP nepresiahlo 5%.

Táto práca vznikla s podporou grantu VEGA 1/0068/03.

[1] Valent I., Zahradníková A., Zahradník I. *In: Mathematical Modelling & Computing in Biology and Medicine,* (V.Capasso Ed.), Esculapio, Bologna, 2003, ss. 213-218.
[2] Valent I., Zahradníková A., Zahradník I. *Chem. Listy 97*, 680 (2003).

1P04

ANALYTICKÉ APLIKACE ELIMINAČNÍ VOLTAMETRIE

Libuše Trnková, Roland Rozik, Jana Topinková, Lenka Zerzánková

Katedra teoretické a fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity, Kotlářská 2, 611 37 Brno, Česká republika, e-mail: libuse@chemi.muni.cz

Téměř před deseti lety byly publikovány teoretické základy nové elektrochemické metody - Eliminační voltametrie s lineární polarizací elektrody (Elimination Voltammetry with Linear Scan- EVLS) [1]. Podstatou metody je matematické zpracování voltametrických křivek s požadavkem některé dílčí proudy eliminovat a jiné zachovat. Požadavek je splněn díky eliminační funkci vyjádřené jako lineární kombinace celkových voltametrických proudů naměřených při různých rychlostech polarizace elektrody. Teorie byla experimentálně verifikována a bylo zjištěno, že EVLS je vhodným nástrojem nejen pro sledování mechanismu elektrodových procesů, ale i pro kvalitativní i kvantitativní analýzu zkoumaných roztoků. V tomto ohledu je především velmi citlivý EVLS signál pro ireverzibilní děj zcela adsorbované elektroaktivní částice získaný pomocí EVLS funkce, eliminující kinetický a kapacitní proud a zachovávající proud difúzní. Specifický tvar tohoto EVLS signálu v podobě píku-protipíku (p-cp) poskytuje: (i) separaci potenciálově blízkých signálů ($\Delta E < 30$ mV), (ii) stanovení více složek v analytu, (iii) odečet velikosti signálu bez korekce na základní linii (base-line correction), (iv) snížení detekčního limitu o jeden až dva řády a (v) zhodnocení elektrodového děje z hlediska předřazené chemické reakce. Analytické aplikace tohoto p-cp signálu je demonstrováno na příkladech elektroanalýzy anorganických i organických depolarizátorů, včetně DNA a oligonukleotidů.

Tato práce byla finančně podporovaná výzkumným projektem INCHEMBIOL (MSM 0021622412), projektem AIP 046, FRVŠ projekty 750/2005, 1147/2005 a 963/2005 od MŠMT České republiky.

[1] Dračka, O., J. *Electroanal. Chem. 402*, 19-28 (1996).
[2] Trnková L., Dračka O., J. *Electroanal. Chem., 413*, 123-129 (1996).
[3] Trnková L., J. *Electroanal. Chem.*, v tisku (2005).

1P05

POTENCIÁLOVĚ MODULOVANÁ VÝMĚNA IONTŮ V POLYPYRROLOVÉM FILMU

Tomáš Bystroň, Karel Bouzek, Petr Holzhauser

Ústav anorganické technologie, Fakulta anorganické technologie, VŠCHT Praha, Technická 5, Praha 6, 166 28, bystronchem@post.cz

Polypyrrol (PPy) patří již několik desetiletí k nejstudovanějším vodivým polymerům. Při syntéze PPy elektrochemickou oxidací pyrrolu (Py) z roztoku dochází z důvodu kompenzace náboje polymerního řetězce k zabudovávání aniontů základního elektrolytu do PPy struktury. Následná polarizace PPy filmu vede k výměně iontů mezi roztokem a polymerem.

Možnou aplikací PPy je jeho uplatnění jako nosiče katalyzátoru v nízkoteplotním palivovém článku (FC). V kyslíko - vodíkovém FC je vyžadováno, aby byl PPy dostatečně prostupný pro H_2 a H^+.

Cílem práce bylo stanovit vliv velikosti a hydratace iontů na jejich transpotrní vlastnosti v PPy filmu. Ke studiu byly vybrány chloristany alkalických kovů.

Byl stanoven podíl náboje x_k, který kationty přenášejí při polarizaci PPy mezi filmem vodivého polymeru a elektrolytem. V prostředí slabě solvatujícího bezvodého acetonitrilu (AN) klesá elektrochemická aktivita a iontovýměnná kapacita filmu a hodnota x_k s rostoucím poloměrem kationtu. V přítomnosti Li^+, Na^+ a K^+ se PPy chová převážně jako katex, v přítomnosti Rb^+, který díky svým rozměrům obtížně proniká do struktury PPy, pak převládá výměna aniontů.

Ve vodném prostředí bylo chování PPy filmů ve všech studovaných elektrolytech srovnatelné. Charakteristiky PPy filmu odpovídaly anexu s vysokou selektivitou. Příčinou bylo zřejmě snížení pohyblivosti kationtů způsobené jejich hydratací.

1P06

VODIVÉ POLYMERY JAKO NOSIČE KATALYZÁTORU V NÍZKOTEPLOTNÍCH PALIVOVÝCH ČLÁNCÍCH

Karel Bouzek, Sabina Moravcová, Petr Holzhauser, Roman Kodým

Ústav anorganické technologie, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká Republika, e-mail: karel.bouzek@vscht.cz

Cílem této práce je podat ucelený pohled na problematiku využití vodivých polymerů jako nosiče katalyzátoru v nízkoteplotních palivových článcích typu PEM (Proton Exchange Membrane).

Zásadní výhoda vodivých polymerů jako nosičů katalyzátoru spočívá podle řady autorů ve zvýšené odolnosti vzniklého kompozitu vzhledem ke katalytické otravě oxidem uhelnatým a ke zvýšení pravděpodobnosti vzniku trojfázového kontaktu uvnitř elektrody. Jak bylo zjištěno v průběhu studia této problematiky v naší laboratoři, vyloučení souvislého filmu vodivého polymeru na povrchu iontově selektivní membrány Nafion sloužící v palivovém článku jako polymerní elektrolyt vede k významnému snížení její permeability pro methanol jako perspektivní palivo. Další výhodu představuje poměrně jednoduchá syntéza kompozitu iontově selektivní membrána/vodivý polymer a jeho modifikace platinovým katalyzátorem.

Uplatnění vodivých polymerů však naráží rovněž na řadu problémů. Vedle omezené chemické stability je zřejmě nejvýznamnější z nich již zmíněná omezená permeabilita vrstvy vodivého polymeru pro palivo. Vedle zvýšení Faradické účinnosti procesu znamená nižší penetraci paliva do objemu filmu vodivého polymeru a tedy omezení elektrodové reakce prakticky pouze na povrch kompozitu. Omezená permeabilita polymerní vrstvy může ve svém důsledku vést rovněž k narušení bilance vody uvnitř polymerního elektrolytu a k jeho postupnému vysychání. Tyto aspekty je nutno mít při návrhu elektrody na bázi vodivého polymeru na zřeteli.

1P07

SONOCHEMIE: SIMULACE ROZLOŽENÍ INTENZITY ULTRAZVUKU A OPTIMALIZACE TVARU ULTRAZVUKOVÉHO REAKTORU

Jiří Klíma

Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského, Akademie věd České republiky, Dolejškova 3, 182 23 Praha, Česká republika, e-mail:klima@jh-inst.cas.cz

Ozařování systému ultrazvukem vysokého výkonu (sonikace) vede k řadě efektů jako je zrychlení přenosu látek, aktivace povrchů reaktantů, katalyzátorů či elektrod, změně mechanismů (elektro)chemických reakcí či vyvolání reakcí nových. Pozorované efekty je možno vysvětlit několika různými možnými mechanismy, které jsou všechny založeny na kavitaci [1, 2], t.j. tvorbě, růstu a ná-sledném kolapsu mikrobublin v roztoku. Existence kavitace je proto předpokladem pro jakýkoliv sono(elektro)chemický efekt. Ke kavitaci dochází pouze je-li intenzita ultrazvuku vyšší než t.zv. kavitační práh. Proto je intenzita ultrazvuku a její rozdělní po reaktoru nejdůležitějším parametrem charakterizujícím ultrazvukové pole.

Zatímco v případě nízké intenzity (používané v diagnostických aplikacích ultrazvuku) je její měření dobře zvládnuto, v případě vysoké intenzity je její měření komplikováno (ne-li znemožněno) kavitací. Z toho důvodu je žádoucí teoretická předpověď. V příspěvku bude ukázáno jak numerické řešení vlnové rovnice poskytuje nejen informace o intenzitě, ale i možnost optimalizace experimentálního uspořádání. Výsledky numerického řešení byly potvrzeny experimentálně.

Tato práce byla finančně podporována grantem MŠMT (grant č. 1P05OC074). v rámci projektu COST (D32/004/04).

[1] Luche J.-L., *Synthetic organic sonochemistry*, Plenum Press, New York 1998.
[2] Klíma J., Bernard C., Degrand C., *J. Electroanal. Chem. 399*, 147 (1995).

1P08

ŠTÚDIUM RÝCHLOSTÍ ESTERIFIKÁCIE

Ján Vojtko

Katedra organickej technológie FCHPT STU, 81237 Bratislava, Radlinského 9
e-mail jan.vojtko@stuba.sk

Sledovali sa rýchlostné konštanty esterifikácie 1-propanolu organickými kyselinami s rôznym stérickým a indukčným efektom. Reakcie sa uskutočňovali v homogénnom prostredí, za použitia 1,4-dioxánu ako inertného rozpúšťadla pri teplote 60°C. Na koreláciu nameraných údajov sa aplikovala Taftova [1] rovnica v tvare:

$$\log k_E = \log k°_E + \rho_I\sigma_I + \delta E_S \quad (1)$$

Z nameraných rýchlostných konštánt esterifikácie 15 kyselín s 1-propanolom sa vypočítala korelačná rovnica v konkrétnom tvare:

$$\log k_E = \log k°_E + 0{,}978\, E_S + 0{,}217\, \sigma_I \quad (2)$$

Analogickým spôsobom sa stanovovala rýchlostná konštanta esterifikácie kyseliny octovej s rôznymi typmi alkoholov, ktoré sa taktiež vyznačovali len stérickými a indukčnými efektami. Na meranie sa použilo 11 rôznych typov alkoholov a z experimentálne nameraných údajov sa vypočítali rýchlostné konštanty esterifikácie, ktoré vyhovovali korelačnej rovnici:

$$\log k_E = \log k°_E - 1{,}549\, \sigma_I + 0{,}268\, E_S \quad (3)$$

Ako je vidieť z konkrétnych tvarov Taftovej korelačnej rovnice (2) a (3), tieto sa zásadným spôsobom líšia. Zatiaľ čo pri esterifikácii alkoholu s rôznymi kyselinami hrá primárnu úlohu stérický efekt, čo súvisí so vznikom aktivovaného komplexu, pri esterifikácii kyseliny alkoholom rozhodujúcu úlohu má indukčný efekt, čo súvisí s nukleofilným atakom na tento komplex. Je to v súlade s mechanizmom esterifikácie a s nameranými údajmi.[2, 3].

Súčasne však stanovené korelačné rovnice umožňujú vypočítať prakticky ľubovoľnú rýchlostnú konštantu esterifikácie, ak príslušné alkoholy a kyseliny spĺňajú základnú podmienku, t.j. že nevykazujú mezomérny efekt a sú pre ne známe korelačné koeficienty σ_I a E_S. Presnosť výpočtu rýchlostných konštánt z korelačných rovníc (2) a (3) je daná súborom meraných látok. Potrebné rovnovážne konštanty sa použili z predchádzajúcich meraní [4], alebo sa stanovili statickou metódou.

[1] Exner O., *Korelační vztahy v organické chemii*. SNTL Praha, 1981, s. 157.
[2] Newling W.B.S., Hinshelwood C.N., J. *Chem. Soc.* 1357 (1936).
[3] Tamilla E., Hinshelwood C.N., J. *Chem.Soc.*,1801 (1938).
[4] Vojtko J., *Z. f. Phys.Chemie 271*, 1227 (1990).

1P09

SUPRAMOLEKULÁRNÍ SENSITIZERY

Jiří Mosinger, Kamil Lang, Dana Marie Wagnerová

Přírodovědecká fakulta UK, Hlavova 2030, 128 43 Praha 2, Česká Republika
e-mail: mosinger@natur.cuni.cz

Design, syntéza a studium vlastností sensitizerů produkujících silně oxidativní, krátce žijící singletový kyslík ($^1O_2$) se v posledních letech rozvinulo v souvislosti s aplikacemi ve fotomedicině, zejména při fotodynamické terapii rakoviny a atherosklerosy, nebo při inaktivaci virů a bakterií. Ve všech případech je využívána silná cytotoxicita $^1O_2$. Často jsou jako účinné sensitizery s minimální temnou toxicitou využívány porfyrinoidy. Jde hlavně o aplikace v biologických systémech, u nichž dochází k nekovalentním interakcím sensitizerů s biomolekulami. V důsledku interakcí se často mění fyzikální a fotofyzikální vlastnosti sensitizerů, navíc část generovaného $^1O_2$ se může spotřebovávat vedlejšími reakcemi s molekulami v bezprostředním okolí [1]. Účinnost sensitizeru dramaticky snižuje vznik dimerů a vyšších agregátů sensitizerů. Cestou k omezení těchto nežádoucích jevů může být použití nosičů jako jsou cyklodextriny, kalixareny nebo liposomy, které zabraňují agregaci a často zvyšují rozpustnost samotného sensitizeru .

Naše studie potvrdily předpoklad, že supramolekulární sensitizery, především porphyriny v host-guest interakci s cyklodextriny (CD) mají vlastnosti výrazně odlišné od volných sensitizerů. Přítomnost cyklodextrinů (CD) ovlivňuje jejich fotofyzikální a fotochemické vlastnosti, buněčný uptake a fototoxicitu [1,2,3].

[1] Lang K., Mosinger J., Wagnerová D.M., *Coordination Chemistry Review*, 248, 321-350 (2004).
[2] Mosinger J., Kliment V. Jr., Sejbal J., Kubát P., Lang K., *J. Porphyrin Phthalocyanines 6*, 514-526 (2002).
[3] Mosinger J., Deumie M., Lang K., Kubát P., Wagnerová D.M *J. Photochem. Photobiol*. A 130, 13-20 (2000).

1P10

OPTIMALIZÁCIA PODMIENOK VYLUČOVANIA PMMA POVLAKU NA ČASTICE Fe PRÁŠKU

Anna Bednáriková*, Renáta Oriňáková, Kvetoslava Markušová, Daniela Kladeková

Prírodovedecká fakulta UK, Katedra analytickej chémie, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, anna_bednarikova@yahoo.com
Prírodovedecká fakulta UPJŠ, ÚCHV, Katedra fyzikálnej a analytickej chémie, Moyzesova 11, 040 01 Košice

Elektrochemické techniky sú bežne používané priemyselne na produkciu kovových povlakov rôzneho zloženia a vlastností s cieľom predĺžiť životnosť a rozšíriť využitie mnohých produktov na prípravu nových funkčných materiálov s netradičnými vlastnosťami. Rovnomerná hrúbka povlaku pri elektrochemickom postupe umožňuje prípravu kvalitných práškových materiálov pre technológie práškovej metalurgie a ich modifikáciu. Okrem kovových povlakov sa v poslednom čase dostávajú do popredia aj polymérne povlaky. Sú rovnako odolné voči korózii a často vykazujú aj ďalšie zaujímavé vlastnosti, napr. ako lubrikanty.

Klasický spôsob výroby polymetylmetakrylátu (PMMA) je založený na voľnej radikálovej polymerizácii monoméru metylmetakrylátu (MMA) v nevodnom prostredí.

Katodická polymerizácia MMA s elektrochemickou iniciáciou vo vodnom prostredí je alternatívnou možnosťou prípravy PMMA. [1]

Železný prášok s vrstvou PMMA bol pripravený galvanostaticky v elektrolyzéri s fluidným lôžkom. Bol študovaný vplyv zloženia elektrolytu, pH a doby elektrolýzy na vylučovanie polymérneho povlaku na časticiach Fe prášku. Na dve nerezové elektródy bol pomocou zdroja konštantného prúdu (LPS 302, AMREL American reliance Inc.) vkladaný prúd 0.5 A. Sledoval sa vplyv zmeny hodnoty pH (hodnoty 1,2,3,4), koncentrácie $K_2S_2O_8$ (c=0.01;0.02;0.03;0.04 mol/l) a času elektrolýzy (t=15,30,45min).

Pripravený prášok bol analyzovaný chromatograficky (pyrolýznou GC) a rozloženie polymérneho povlaku bolo sledované pomocou optického mikroskopu.

Na základe získaných experimentálnych výsledkov boli stanovené optimálne podmienky vylučovania PMMA na Fe prášku.

Práca bola finančne podporená GA SR, VEGA, číslo projektu 1/2118/05.

[1] Cram, S.L.; Spinks. G.M. ; Wallace, G.G.; Brown, H.R.: *J Appl Polym Sci* 2003, Vol ,87, 765 - 773.

1P11

MODELOVÁNÍ CELY PRO PŘÍMOU ELEKTROCHEMICKOU DEZINFEKCI PITNÉ VODY

Kodým R.[1], Bergmann H.[2], Bouzek K.[1]

[1]*Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 16628 Praha 6, roman.kodym@vscht.cz;*
[2]*Anhalt University of Applied Sciences, D - 06366 Koethen/Germany;*

Přímá elektrochemická úprava pitné vody (Direct Electrochemical Water Treatment) je v současnosti předmětem rostoucího zájmu [1]. Výhodou je využití přirozeného obsahu chloridů v pitné vodě k tvorbě látek s dezinfekčními účinky. Avšak nízká vodivost a složitost reakčního mechanismu zabraňuje širšímu průmyslovému uplatnění tohoto způsobu úpravy pitné vody [2].

Presentovaná práce se zaměřila na matematické modelování elektrolyzéru pro přímou dezinfekci pitné vody. Cílem bylo posoudit vliv vodivosti zpracovávané vody, geometrie a struktury elektrod a kinetiky elektrodových reakcí na provozní parametry elektrolyzéru. Studován byl rovněž vliv možných konstrukčních nepřesností.

Bylo modelováno pravoúhlé uspořádání deskových elektrod a elektrod z tahokovu. Vyvinutý 2D model uvažoval primární a sekundární rozložení proudových hustot pro proudové zatížení od 50 do 300 A m^{-2} a vodivost elektrolytu nepřesahující 2500 μS m^{-1}. Laplaceova rovnice byla řešena metodou konečných prvků programového balíku FEMLAB [3].

Zvláštní pozornost byla věnována výskytu nehomogenit v rozložení proudových hustot a lokálních potenciálů. Nižší vodivostí elektrolytu, stejně tak uvažováním kinetiky elektrochemických reakcí a zvláště pak zaoblením hran elektrod se značně potlačuje přítomnost těchto nerovnoměrností. Naopak, vzhledem k výskytu lokálních maxim proudových hustot se jeví nevýhodná aplikace tahokovu. Problematika rozložení proudových hustot je významná zejména z důvodu omezení tvorby nežádoucích meziproduktů a z hlediska minimalizace koroze elektrod.

[1] Bergmann H., Iourtchouk T., Schöps K., Ehrig F.; *GWF-Wasser Abwasser*, 142 (12) (German), 856-869, (2001).
[2] Bergmann, H.; Koparal, *Galvanotechnik*, 95 (12), 3037-3043 (German), 2004.
[3] FEMLAB user's guide, 2005, www.femlab.com.

1P12

SPECIAČNÍ ANALÝZA STOPOVÝCH PRVKŮ V POTRAVINÁCH ROSTLINNÉHO PŮVODU

Jan Polák, Oto Mestek, Richard Koplík, Jiří Šantrůček, Milan Kodíček

VŠCHT Praha, e-mail: jan.polak@vscht.cz

Speciační analýza Cu, Zn, Mo, Cd v extraktech žitné a

kukuřičné mouky byla prováděna pomocí on-line spojení SEC-ICP-MS. Většina kovů byla soustředěna v nízkomolekulární frakci 1000-2000 g/mol. Tato frakce byla schopna vázat až dvacetinásobek přirozeného obsahu kovů. Frakce byla ve větším množství získána pomocí preparativní SEC a dále přečištěna na Chelexu v Cu^{2+} cyklu. Analýzy provedené pomocí spektroskopie MALDI-MS sloužily k přesnému určení molární hmotnosti, dominantní pík v hmotnostním spektru žita odpovídal hmotnosti 1752 g/mol, zatímco dominantní pík v hmotnostním spektru kukuřice odpovídal hmotnosti 1627 g/mol. Analýzy dále nepotvrdily původní předpoklad přítomnosti fytochelatinů jakožto vazebných ligandů stopových prvků. Dalšími analyzovanými vzorky byly extrakty z listí a kořenů žita pěstovaného v laboratorních podmínkách za přítomnosti $Cd(NO_3)_2$. Obsah Cd v těchto vzorcích byl o více než dva řády vyšší než obsah Cd v kontrolním vzorku, jeho extrahovatelnost však byla poměrně nízká. Analýzy pomocí SEC-ICP-MS ukázaly, že u obou vzorků je Cd vázáno převážně ve frakci 2000-4000 g/mol, tato frakce byla následně izolována a podrobena analýze pomocí MALDI-MS.

Tato práce je podporována projektem Grantové agentury České republiky č. 525/04/0503.

1P13

NOVEL ELECTROCHEMICAL METHOD FOR THE SENSITIVE DETERMINATION OF DAMAGE TO DNA WITH CARBON NANOTUBES-BASED BIOSENSOR

Renáta Ovádeková, Katarína Špirková, Soňa Jantová, Ján Labuda

Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, 81237 Bratislava, Slovakia,
e-mail: renata.ovadekova@stuba.sk

Association interactions and structural attack to biopolymers such as DNA belong to general ways of effects of toxic species which are important particularly from the point of view of human health and ageing processes. Today, DNA is typically used as a biocomponent at the biosensors with rather specific application area at the determination of DNA sequence and the evaluation of DNA host-guest interactions damage. High sensitivity, small dimensions, low cost and cheap exploitation belong to general advantages of electrochemical biosensors. Due to their unique mechanical, chemical and electrical properties, carbon nanotubes could significantly improve the behavior of an electrochemical signal transducer.

With respect to antimicrobial, anti-inflamatory, diuretic, anticonvulsant, antiallergic, antihypertensive, antiparkinsonian and anticancer effects. Derivatives of quinazolines are used in the pharmaceutical industry, medicine and agriculture.

In this work, a screen-printed electrode based on a multiwaled carbon nanotubes with the surface modified by calf thymus dsDNA has been prepared and applied to the study of an integrity of the surface attached DNA. Interactions of quinazoline with DNA have been detected voltammetrically using a DNA redox indicator. A comparative study using agarose gel alectrophoresis and biological tests was also performed. The results are compared with those obtained by agarose gel electrophoresis.

This work was supported by the Grant Agency APVT (No. 20-015904).

1P14

VYBRANÉ KAPITOLY Z ELEKTROANALÝZY NA UHLÍKOVÝCH PASTOVÝCH ELEKTRODÁCH

Ivan Švancara, Michal Galík, Tomáš Mikysek, Lucie Baldrianová, Eva Tesařová, Karel Vytřas

Katedra analytické chemie,
Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice,
Nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice;
e-mail: Ivan.Svancara@upce.cz

Již téměř půl století patří uhlíkové pasty k nejoblíbenějším materiálům pro laboratorní zhotovování elektrod a detektorů [1]. Vedle řady jedinečných vlastností je u uhlíkových pastových elektrod (CPE) oceňována zejména schopnost snadné a účinné modifikace, která nabízí takřka neomezené možnosti pro elektroanalytická měření.

Názorným příkladem mohou být CPE modifikované organickými činidly, které v režimu elektrochemické rozpouštěcí analýzy umožňují nakoncentrovat a posléze stanovit četné anorganické ionty prostřednictvím tvorby iontových párů (např. s anionty $PtCl_6^{2-}$ a $IrCl_6^{3-}$ [1]) popř. chelátových struktur (sloučeniny skupiny mono- a bis(imidazolyl) pyridinů [2]).

Uhlíkové pasty se také s úspěchem uplatňují při vývoji a testování nových typů nertuťových elektrod, což je jeden z výrazných trendů moderní elektroanalýzy. V posledních letech se např. věnuje značná pozornost bismutových elektrodám [3], které mají šanci nahradit osvědčenou, avšak stále problematičtější kovovou rtuť. Uhlíkové pasty, jakožto typicky heterogenní materiál, jsou pak pro přípravu těchto čidel použitelné hned ve třech podobách: jako podklad pro nanášení povlaku bismutu (i) z roztoku s ionty Bi^{3+} popř. (ii) z pevného Bi_2O_3 obsaženého v pastě, nebo (iii) ve formě kompozitního substrátu s jemně rozptýleným kovovým bismutem. Každá z těchto variant má svá specifika, nicméně všechny demonstrují všestrannost využití uhlíkové pasty jako takové.

Tato práce vznikla za podpory Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (projekty č. MSM 0021627502 a KONTAKT 01-2004-05) a Grantové agentury České republiky (projekty č. 203/04/0136 a 203/04/0646).

[1] K. Kalcher, I. Švancara, R. Metelka, K. Vytřas, A. Walcarius, v: *Encyclopedia of Sensors*, Vol. I-X, (C.A. Grimes, E.C. Dickey, M.V. Pishko, eds.), American Scientific Publishers, Stevenson Ranch, California (U.S.A.), v tisku.

[2] T. Mikysek, I. Švancara, P. Drabina, M. Sedlák, K. Vytřas, v: *Moderní elektrochemické metody XXIV*, Sborník přednášek (J. Barek, J. Labuda, T. Navrátil, L. Novotný, eds.), str. 25-27; Česká společnost chemická, Praha (2004).
[3] A. Economou: *Trends Anal. Chem. 24*, 334 (2005).

1P15

MOŽNOSTI ATOMOVÉ ABSORPČNÍ SPEKTROMETRIE V ANALÝZE KLINICKÝCH MATERIÁLŮ

David Milde

Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého, Tř. Svobody 8, 771 46 Olomouc, Česká republika, e-mail: david.milde@upol.cz

Atomová absorpční spektrometrie (AAS) i přes nemožnost provádění simultánního stanovení patří stále mezi nejrozšířenější metody prvkové stopové analýzy a je poměrně často používána v klinických a biochemických laboratořích. Mezi běžně studované klinické materiály patří krev a krevní deriváty (nejčastěji sérum či plazma), dále pak moč a v menší míře různé tkáně a také vlasy či nehty.

Příspěvek je zaměřen na praktické zkušenosti s uchováváním a přípravou vzorků krevního séra, moče a tkání tlustého střeva pro analýzu jednotlivými atomizačními technikami v AAS. Dále jsou uvedeny možnosti a omezení stanovení makro (např. Na, K, Ca či Mg) i mikroprvků (př. Fe, Cu, Zn) pomocí plamenové atomizace a stopových prvků (např. Cd, Pb, Ni, Cr, Se) pomocí elektrotermické atomizace v jednotlivých matricích. Plamenovou atomizací lze kapalné vzorky stanovovat pouze s minimální úpravou spočívající v ředění vodou nebo jiným vhodným činidlem. Elektrotermickou atomizaci lze využít k přímé analýze kapalných klinických vzorků poněkud obtížně, snadnější je analýza mineralizovaných vzorků. Některé prvky, jako např. As, Se či Hg, lze stanovit s využitím generování těkavých sloučenin. Tato atomizační technika je časově náročná, ale umožňuje významné snížení interferencí vzhledem k separaci plynné fáze od kapalné. Pevné vzorky (vlasy, tkáně) a kapalné vzorky se složitou matricí (plná krev, krevní sérum) bývají často před analýzou rozkládány. Možnosti rozkladu zejména v uzavřených systémech jsou také v tomto příspěvku zahrnuty.

1P16

EPR STUDY OF PHOTOCHEMICAL PROCESSES IN CAROTENOIDS

Dana Dvoranová, Vlasta Brezová, Marián Valko

Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, SK-812 37, Slovak Republic e-mail: dana.dvoranova@stuba.sk

Carotenoid pigments, widely distributed in nature, play important roles in the living organisms, e.g. in the light-harvesting antenna systems, electron transfer processes in the photosynthetic reaction centers, in vitamin A production, as well as in cell protection mechanisms against free radicals induced damage [1, 2].

The photochemical behavior of ß-carotene was investigated in the dimethylsulfoxide and ethanol solutions using *in situ* EPR spin trapping technique (irradiation in EPR cavity). The application of 5,5-dimethyl-1-pyrroline N-oxide (DMPO) and α-(4-pyridyl-1-oxide)-N-*tert*-butylnitrone (POBN) showed the substantial role of oxygen in the photochemical reaction pathway. Under inert atmosphere we observed during photoexcitation the formation of carbon-centered radical adducts produced by β-carotene skeleton cleavage. The photogeneration of $^{\bullet}$POBN-O_2^-, $^{\bullet}$DMPO-O_2^- was identified upon exposure of aerated or oxygen-saturated β-carotene solutions. The identification of superoxide anion radical formation was obtained by addition of specific enzyme superoxide dismutase (SOD) to the photochemical systems. The generation of reactive radical intermediates was confirmed using stable free radical 4-hydroxy-2,2,6,6-tetramethylpiperidine N-oxyl (TEMPOL) monitoring the decline of EPR signal intensity during exposure of β-carotene solutions under inert and aerated atmosphere [3].

We thank the Slovak Grant Agency for financial support (VEGA/1/0053/03).

[1] Martin H. D., Ruck C., Schmidt M., Sell S., Beutner S., Mayer B., Walsh R., *Pure & Appl. Chem.* 71, 2253-2262 (1999).
[2] Gao Y., Kispert L. D., *J. Phys. Chem.* B 107, 5333-5338 (2003).
[3] Brezová V., Gabčová S., Dvoranová D., Staško A., *J. Photochem. Photobiol. B: Biol. 79*, 121-134 (2005).

1P17

KVANTOVĚ-CHEMICKÁ STUDIE REORGANIZACE SÍTĚ VODÍKOVÝCH VAZEB V MOLEKULE CALIX[4]ARENU

Jiří Matoušek,[1] Petr Kulhánek,[1,2] Michal Čajan,[3] Jaroslav Koča[1,2]

[1] Národní centrum pro výzkum biomolekul, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita v Brně, Kotlářská 2, 611 37 Brno, Česká republika, e-mail: matousek@chemi.muni.cz
[2] Katedra organické Chemie,Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita v Brně, Kotlářská 2, 611 37 Brno, Česká republika
[3] Laboratoř růstových regulátorů, Univerzita Palackého a Ústav experimentální botaniky AV ČR, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc, Česká republika

U calixarenů obsahujících v makrocyklu čtyři aromatické jednotky (calix[4]areny) byla popsána a prostudována rovnováha mezi čtyřmi základními konformery - kónickým, částečně kónickým, 1,2-alternujícím a 1,3-alternujícím. Pokud struktura calix[4]arenu obsahuje čtyři hydroxylové skupiny na dolním okraji, je kónický konformer nejstabilnější. Jeho stabilita je dána pravidelným uspořádaním čtyř vodíkových vazeb, které jsou díky symetrii calixarenu ekvivalentní. Jedná se tak o jeden z nejjednodušších příkladů sítě vodíkových vazeb tvořících cyklickou strukturu. Calix[4]aren může proto sloužit jako modelový systém pro studium kooperativního efektu a dynamiky v takto uspořádáných vodíkových vazbách. Dvojí možná orientace hydroxylových skupin vnáší do systému chiralitu. Pro vzájemný přechod mezi dvěma enantiomery je možné navrhnout dva principiálně odlišné mechanismy - přeskok protonu a rotaci okolo C-O vazeb. Z energetického hlediska byla tato reorganizace již studována NMR experimenty [1]. Přestože existuje hypotéza kvantového tunelování protonů [2,3], mechanismus přechodu mezi enantiomery dosud nebyl přesně navržen a potvrzen. V této práci jsou systematicky prozkoumány možné mechanismy reorganizace vodíkových vazeb s použitím DFT a RI-MP2 výpočtů.

[1] Lang J., Deckerová V., Czernek J., Lhoták P. , *Journal of Chemical Physics, 122*, Art. No. 044506, (2005).
[2] Brougham D. F., Caciuffo R., Horsewill A. J., *Nature, 397*, 241-243, (1999).
[3] Fernandez-Ramos A., Smedarchina Z., Pichierri F., *Chemical Physics Letters, 343*, 627-632, (2001).

1P18

QUANTITATIVE EPR SPECTROSCOPY - AN ACCURATE POSITIONING OF EACH SAMPLE IN THE CAVITY IS ESSENTIAL

M. Mazur, J. Moncol, M. Valko

Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK - 812 37 Bratislava, Slovak Republic; e-mail: milan.mazur@stuba.sk

A multitude of sources of errors influences the accuracy and reproducibility of quantitative EPR spectroscopy. The most important sample-associated error source in quantitative EPR measurements is the sample positioning and orientation within the microwave cavity. Variation in these parameters could cause significant errors in the primary phase of quantitative EPR analysis (i.e., data acquisition). Therefore, the above-mentioned topic was recently systematically studied in our EPR laboratory. The main aim of this contribution is to give useful suggestions, recommendations and simple procedures how to minimize the influence of such primary error sources in quantitative EPR measurements: (i) Accurate and precise positioning of each sample in the microwave cavity is the principal, necessary, and imperative condition in quantitative EPR spectroscopy. (ii) A special alignment procedure for the accurate and precise positioning of samples in the microwave cavity is essential in quantitative EPR spectroscopy. (iii) The sample position in the cavity at which the signal intensity is a maximum should be specified. (In the ideal case, the sample center coincides with the center of the cavity). We believe that these tips would be helpful in quantitative EPR practice.

This work was supported by Science and Technology Assistance Agency under the contact No. APVT-20-005702, and by Slovak Grant Agency for Science (VEGA 1/2450/05 and VEGA 1/0053/03).

1P19

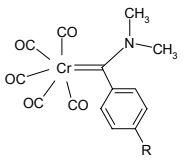
ELEKTROCHEMICKÉ STUDIUM INTRAMOLEKULÁRNÍCH ELEKTRONICKÝCH INTERAKCÍ V AMINOKARBENOVÝCH KOMPLEXECH CHROMU

Jiří Ludvík[a], Jana Roháčová[a,c], Irena Hoskovcová[b], Dalimil Dvořák[c]

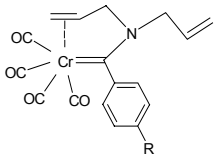
[a] Ústav fyzikální chemie Jaroslava Heyrovského AVČR, Dolejškova 3, 182 23 Praha 8. e-mail: ludvik@jh-inst.cas.cz
[b] Ústav anorganické chemie VŠCHT, Technická 5, 166 28 Praha 6, e-mail: irena.hoskovcova@vscht.cz;
[c] Ústav organické chemie VŠCHT, Technická 5, 166 28 Praha 6, e-mail: dalimil.dvorak@vscht.cz

Karbenové komplexy mající formálně dvojnou vazbu mezi uhlíkovým atomem a centrálním atomem kovu nacházejí široké uplatnění zejména v syntéze, a to jak v katalytických,

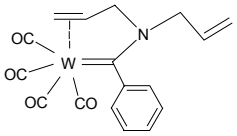
tak i ve stechiometrických reakcích. Pro tuto studii byly připraveny dvě serie aminokarbenových komplexů chromu substituovaných na ligandovém fenylovém kruhu: jednak pentakarbonyl karbenové komplexy **Ia-e,** jednak chelatované tetrakarbonyl karbenové komplexy **IIa,c,d,e**. Pro srovnání byly pak připraveny ještě komplexy **III a IV**. Všechny látky byly v bezvodém prostředí elektrochemicky oxidovány a redukovány. Na základě závislosti elektrochemických dat na struktuře molekul za využití LFER (Linear Free Energy Relationship) byly formulovány obecné závěry týkající se lokalizace redox center v molekule a jejich vzájemné elektronické interakce.



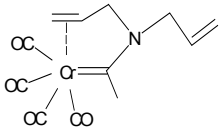
I a-e
(R = OCH_3, CH_3, H, Cl, CF_3)



II a,c,d,e
(R = OCH_3, H, Cl, CF_3)



III



IV

Bylo zjištěno, že redukční centrum Fischerových karbenových komplexů je lokalizováno na karbenové dvojné vazbě a proto je redukce ovlivněna výhradně typem a strukturou substituentů na karbenovém uhlíku. Na druhé straně oxidace probíhá ne centrálním atomu kovu a závisí silně na typu, počtu a způsobu koordinace všech ostatních ligandů.

Bylo experimentálně prokázáno, že vzájemná interakce (tedy rozsah elektronové delokalizace) mezi karbenovým centrem a substituenty v *p*-poloze na fenylovém kruhu závisí na rotační bariéře fenylového kruhu vůči rovině karbenové dvojné vazby. Tato bariéra je ovlivňována též samotnými *p*-fenylsubstituenty díky jejich vlivu na délku *ortho*-C-H vazby. Je-li navíc v *ortho*-poloze na fenylovém jádře methylová skupina, rotační bariéra je výrazně větší a zmíněná interakce daleko slabší. Tento jev závisí též samozřejmě na substituci aminového dusíku a na chelataci.

Tato práce byla podporována grantem GAČR č. 203/04/0487.

[1] Hoskovcová, I.; Roháčová, J.; Meca, L.; Tobrman, T.; Dvořák, D.; Ludvík, J., *Electrochim. Acta*, přijato k publikování v prosinci 2004.

1P20

FEMTOSEKUNDOVÁ LASEROVÁ SPEKTROSKOPIA FLUORESCENČNÝCH VLASTNOSTÍ POLYTIOFÉNOV

Ignác Bugár[a], Michal Žitňan[b], Dušan Velič[a,b], Gabriel Čík[c]

[a]*Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, e-mail: bugar@ilc.sk*
[b] *Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prírodovedecká fakulta UK, Mlynská dolina CH1, 842 15 Bratislava, e-mail: velic@prifuk.uniba.sk;*
[c] *Katedra environmentálneho inžinierstva, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, e-mail: gabriel.cik@stuba.sk*

Pomocou statickej a časovo-rozlíšenej spektroskopie sa študovali súvislosti medzi fluorescenciou a štruktúrou reťazcov poly(3-dodecyltiofénu) (PDDT), ako jedneho reprezentanta derivátov polyalkyltiofénov. Deriváty polytiofénov sú intenzívne skúmané hlavne kvôli ich potenciálnemu využitiu v optoelektronických zariadeniach. Modifikáciou ich štruktúry je možné ovplyvniť aj ich optické vlastnosti, vrátane farby a kvantového výťažku fluorescencie [1]. Vyšetrovanie vzťahu medzi fluorescenčnou dynamikou a štruktúrou PDDT sa uskutočnilo na niekoľkých úrovniach. Vplyv regioregularity bol skúmaný u roztokov vzoriek PDDT, s rôznym stupňom konfiguračných porúch [2]. Porovnanie roztokov s tuhými filmami PDDT potvrdilo vplyv medzireťazových interakcií. Fluorescenčné vlastnosti tenkých vrstiev polyméru poskytli informácie o agregácii polymérnych reťazcov. Modifikácia polymérnej štruktúry dopáciou tuhých filmov umožnila skúmať vplyv vygenerovaných polarónov. Tuholátkové vzorky vykazovali v rozsahu 450 - 500 nm silnú závislosť tvaru emisného spektra od excitačnej vlnovej dĺžky. Na základe statických spektier a femtosekundovej laserovej spektroskopie pri vybraných vlnových dĺžkach v rozsahu 530 - 620 nm bola skúmaná dynamika excitovaného stavu. Získané výsledky poukazujú na možnosť preskakovania excitónov medzi polymérnymi segmentami a reťazcami [3]. Časovo rozlíšená spektroskopia odhalila aj vplyv excitónových pascí a polarónov na dynamiku excitovaného stavu PDDT.

[1] Chan, H.S.O.; Ng, S.C. *Prog. Polym. Sci*., 23, 1167 (1998).
[2] Bugar, I.; Kovac, J.; Matuszna, K.; Lukes, V.; Cik, *G. Laser Phys*., 14, 527 (2004).
[3] Brunner, K.; Tortschanoff, A.; Warmuth, Ch.; Bassler, H.; Kauffmann, H.F. *J. Phys. Chem. B*, 104, 3781 (2000).

1P21

ALKALICKÉ SILIKÁTOVÉ ROZTOKY VODNÍCH SKEL, STRUKTURA TĚCHTO ROZTOKŮ A JEJÍ VÝZNAM PRO CHEMICKOU A FYZIKÁLNÍ KONVERZI SOL-GEL

Jiří Pavlovský[a], Petr Jelínek[b]

[a] *Katedra analytické chemie a zkoušení materiálu, Vysoká škola báňská - Technická univerzita Ostrava, 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava - Poruba, Česká republika, e-mail: jiri.pavlovsky@vsb.cz*
[b] *Katedra slévárenství, Vysoká škola báňská - Technická univerzita Ostrava, 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava - Poruba, Česká republika*

Roztoky alkalických silikátů, vodních skel, našly uplatnění především v oblastech slévárenství a stavebnictví. Patent LVA PETRŽELY[1] z padesátých let znamenal zahájení chemizace výroby forem a jader nejen v česko-slovenských slévárnách, ale prakticky v celé Evropě. Byly tím položeny základy k chemickému vytvrzování pojiv na bázi alkalických silikátů. Dnes rozeznáváme dva typy vytvrzování roztoků vodních skel, a to chemický nebo fyzikální způsob. Mechanické vlastnosti vytvrzených směsí dovolují odlévání těžkých, masivních odlitků z litiny a ocelí. Dále je možno vodní skla vytvrzovat estery, aldehydy, kyselinami, hutnickými vysoce rozpadavými struskami a jinými vytvrzujícími prostředky.

Pozornost je věnována struktuře koloidních roztoků alkalických silikátů z pohledu ^{29}Si NMR spektroskopie při konverzi sol-gel. Především byla zkoumání roztoků zaměřena na posouzení vlivu struktury vodních skel, na kinetiku procesu alkalických silikátů cestou vytvrzování pomocí esterů kyseliny octové, dále pak vlivu silikátového modulu, koagulačního prahu, zředění alkalických silikátů dvou modulů (M=2,37 a 3,30), porovnání z pohledu velikosti a distribuce částic a vlivu hydrolýzy na ustavení rovnováhy. Dále jsou to vlivy na technologii přípravy těchto roztoků (přímé rozpouštění nebo výrobou přes „sklářský kmen“), hustoty. Zkoumán byl i vliv „atypických“ (draselná, lithná apod.) vodních skel na strukturu a pevnostní vlastnosti. NMR spektroskopie byla doplněna o techniky IČ, UV-VIS a XRFS spektroskopie[2,3].

[1] PETRŽELA L.: Čs. Patent č. 81931 (12.XII. 1947).
[2] PAVLOVSKÝ, J., THOMAS, B., BRENDLER, E., POLZIN, H., TILCH, W., ŠKUTA, R., JELÍNEK, P.: *Untersuchungen zum Einfluss des Silikatmoduls und der Verdünnung auf die Struktur von Wasserglaslösungen, einschließlich der Festigkeitseigenschaften und zur Kinetik des Härtungsprozesses,* Giesserei-Praxis, Fachheft: Formstoffe und Formverfahren, 3/2005, S. 82-88.
[3] PAVLOVSKÝ, J.: *The influence of silicate module, Glucitol addition and dilution on the natriumwaterglasses by ^{29}Si NMR Spectroscopy*, 18th NMR Valtice, Central European NMR discussion groups, Valtice, Masarykova univerzita v Brně, 2003, s. 33.

1P22

LASER ABLATION INDUCTIVELY COUPLED PLASMA SPECTROMETRY FOR DEPTH PROFILE ANALYSIS OF METAL AND CERAMIC COATINGS

Viktor Kanický, Linda Zaorálková, Aleš Hrdlička, Vítězslav Otruba

Laboratoř atomové spektrochemie, Katedra analytické chemie,
PřF Masarykovy univerzity v Brně, Kotlářská 2,
611 37 Brno
viktork@chemi.muni.cz

In recent years a choice of instrumental analytical methods became available to carry out depth profile analysis on solid samples. With laser ablation based (LA) techniques, the depth profiling in micrometer range (from X Ķm to 0.X mm) is feasible, too. LA device is used for aerosol generator into inductively coupled plasma atomic emission (or mass) spectrometry (LA-ICP-AES, LA-ICP-MS). Limitations and possibilities of this technique is shown on examples of 3-Ķm resistant ZrTiN coatings [1, 2], zinc-coated iron sheets [3] (thickness 10-30 Ķm) and ceramic wall tiles (glaze coating 200 Ķm, engobe layer 100 Ķm). Operating conditions of infrared and ultraviolet pulsed lasers are studied and results compared. Both ICP-OES and ICP-MS are used as combined techniques.

[1] Kanický V., Musil J., Mermet J.-M., *Appl. Spectrosc.*, 51, 1037-1041 (1997).
[2] Kanický V., Kuhn H.-R., Guenther D., *Anal. Bioanal. Chem. 380*, 218-226 (2004).
[3] Hrdlička A., Otruba V., Novotný K., Guenther D., Kanický V., *Spectrochim. Acta Part B, 60*, 307-318 (2005).

1P23

PRÍPRAVA A VLASTNOSTI NOVÝCH DERIVÁTOV 2-ETOXYCHROMÓNOV

J. Benko[1], O. Vollárová[1], I. Černušák[1], M. Lácová[2], Z. Benková[2], M. Aranyosiová[3]

[1]*Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie,*
[2]*Katedra organickej chémie, Univerzita Komenského Prírodovedecká fakulta, Bratislava,*
[3]*Medzinárodné laserové centrum Bratislava.*

Nové deriváty etoxychromónov sa pripravili reakciou kyseliny fenyloctovej alebo kyseliny fenylsulfanyloctovej s chromón-3-karbaldehydom v prostredí anhydridu kyseliny octovej a octanu draselného pri 80 °C. Štruktúra a čistota produktov bola určená z NMR spektier a elementárnou analýzou. Namerali sa rýchlostné konštanty alkalickej hydrolýzy 2-oxochromónov v zmesi voda - dioxán (30:70% V). Ukázalo sa, že látky v ktorých je benzénové jadro viazané prostredníctvom síry sú menej stabilné ako látky v ktorých je benzénové jadro naviazané priamo na základnú

štruktúru. Zo závislostí rýchlostnej konštanty alkalickej hydrolýzy 3-(fenylsulfanyl)-2-oxo-*2H,5H*-pyrano[3,2-*c*]chromón-2-ylacetátu od koncentrácie β- a γ- cyklodextrínu sa vypočítali príslušné asociačné konštanty K_β=227 mol^{-1} dm^3 a K_γ=474 mol^{-1} dm^3 pri 25°C. Namerali sa IČ spektrá vzoriek v pevnej fáze. Optimalizácia geometrie, výpočet nábojového rozloženia a IR spektier sa uskutočnili na úrovni B3LYP/cc-pVDZ pre 3-(PhX)-2-oxo-2*H,5H*-pyrano[3,2-c]chromón-2-ylacetáty (X= S, Se, O). Výpočet ukázal, že ani benzén priamo naviazaný na základnú štruktúru nie je s ňou komplanárny. Rozdiely v nábojových hustotách na karboxylovom uhlíku sú v súlade s výrazne rozdielnou, experimentálne určenou, reaktivitou rozdielnych derivátov voči nukleofilnému ataku na tomto centre.

Práca je financovaná z prostriedkov úlohy APVT-20-029804.

1P24

INTERACTIONS OF MONOVALENT CATIONS WITH ACETONITRILE

Ivan Černušák, Oľga Kirdajová, Oľga Vollárová, Ján Benko, Milan Uhlár

Department of Physical and Theoretical Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Mlynská dolina CH1, 84215 Bratislava, Slovakia
e-mail: cernusak@fns.uniba.sk

We have studied solvation of monovalent cations (Me^+) of alkali metals - Na^+, K^+, Rb^+ and Cs^+, rare metals - Cu^+, Ag^+, Au^+ and p-block elements Ga^+, In^+ and Tl^+ with acetonitrile. *Ab initio* calculations and Time-of-Flight Secondary Ion Mass Spectrometry (TOF-SIMS) have been employed. Optimization of the structures of complexes $Me^+\ldots CH_3CN$ was carried out using SCF, MP2 and CCSD(T) methods in Pol and Pol_dk basis sets. The binding energies of these donor-acceptor complexes have been estimated, taking into account the basis set superposition error, zero-point vibrations, correlation contribution and relativistic corrections. Results are in good agreement with experiment. It has been found that theoretical $\Delta G0_{298K}$ values based on binding energies correlate fairly well with experimental transfer Gibbs energies (from water to acetonitrile) for the series of cations. In the case of heavy elements, especially for gold, relativistic corrections turned out to be extremely important. Structure of the complex of Ag+ and Na+ with acetonitrile was determined also by TOF-SIMS.

2P01

PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE NOVÝCH DERIVÁTŮ ALUMAZENU

Jiří Löbl, Jiří Pinkas*

Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Kotlářská 2, CZ-611 37 Brno, lobl@chemi.muni.cz, jpinkas@chemi.muni.cz;

1,3,5-trimethyl-2,4,6-tris(2,6-di*i*sopropylfenyl)alumazen je dosud jediný známý zástupce[1] trimerních poly(N-alkyliminoalanů). Připravuje se reakcí trimethylalanu s 2,6-diisopropylanilinem[2].

S cílem připravit nové cyklické a polyedrické organoaluminofosfonáty jsme studovali reakce alumazenu s trimethylsilylestery fosfonových kyselin[3]. Reakcí alumazenu s bis(trimethylsilyl)esterem kyseliny methylfosfonové jsme dealkylsilylační reakcí připravili bicyklický aluminofosfonát. Obdobný produkt jsme získali reakcí alumazenu s bis(trimethylsilyl)esterem kyseliny fenylfosfonové, ale tyto dvě sloučeniny jsou strukturně odlišné v poloze substituentů můstkové fosfonátové skupiny nad kruhem alumazenu. Zcela jinak probíhá reakce alumazenu s bis(trimethylsilyl)esterem kyseliny trichlormethylfosfonové. Produktem této dealkylsilylační reakce je spirosloučenina, u které došlo k přeuspořádání kruhu alumazenu a inzerci fosfonátu do cyklu. Při reakci alumazenu s trifenylfosfinoxidem dochází ke vzniku bisaduktu.

Dále jsme studovali reakce alumazenu s dusíkatými bazemi. Ve všech případech dochází ke vzniku aduktů. V závislosti na substituentu dochází ke vzniku aduktů s rozdílnou izomerií. Produkty reakcí byly charakterizovány pomocí NMR spektroskopie, rentgenové strukturní analýzy a dalších analytických a spektroskopických metod.

Tato práce byla finančně podporována grantem MŠMT (0021622410) a GAČR (203/04/0296).

[1] Waggoner K.M., Power P.P.: *J. Am. Chem. Soc. 113*, 3385 (1991).
[2] Pinkas J.: Inorganic Benzene Analog. In *Inorganic Experiments*, J. D. Woolins, Ed. ed. Wiley-VCH, 357 (2003).
[3] Pinkas J., Löbl J., Dastych D., Nečas M., Roesky H.W.: *Inorg. Chem. 41*, 6914 (2002).

2P02

MOLECULE-BASED MAGNETS

Roman Boča

Department of Inorganic Chemistry, Slovak University of Technology, 812 37 Bratislava, roman.boca@stuba.sk

The cooperative magnetic ordering has been identified for a variety of low-nuclearity molecule-based materials as proven by the field-cooled magnetization, zero-field-cooled magnetization, out-of-phase alternating current susceptibility, and finally by measuring the hysteresis loop. A mononuclear Co(II) complex with a pentadentate Schiff-base ligand shows the magnetic ordering at T_C = 4 K. This S = 3/2 system exhibits a strong positive magnetic anisotropy resulting in the ESR-active ground Kramers doublet [1]. A dinuclear Ni(II) complex held by two tricyanomethanide bridges $[(L^4)Ni(tcm)2Ni(L^4)](ClO_4)_2$, S = 2, is the molecule-based magnet below T_C = 16 K. A linear trinuclear Mn(II) complex $[Mn(L^3)Mn(ac)_4Mn(L^3)]$ linked by four acetato bridges and with terminal tridentate Schiff-base ligands L^3, S = 5/2, displays the magnetic ordering below 20 K. The mononuclear Ni(II) complex $[Ni(thpy)_2(H_2O)_2(ac)_2]$ with the thieno[3,2-*c*]pyridine ligands, S = 1, possesses a complex crystal packing and shows features of a magnetic ordering. Surprising magnetic behavior exhibits the mononuclear square-planar Ni(II) complex with a tetradentate Schiff-base ligand for which the diamagnetism is expected. However, the orbital angular momentum is present, $L \neq 0$ and this is responsible for the magnetic ordering, T_C = 20 K, including the hysteresis effect seen at 4.2 K.

2P03

KRYŠTALOCHEMICKÉ ASPEKTY ANORGANICKO-ORGANICKÝCH HYBRIDNÝCH ZLÚČENÍN NA BÁZE OXOVANADIČNANOV

Ľ. Žúrková[1], E. Rakovský[1], R. Gyepes[2], P. Schwendt[1], Z. Mička[2]

[1] *Katedra anorganickej chémie Prírodovedeckej fakulty Univerzity Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, SR; zurkova@fns.uniba.sk*
[2] *Katedra anorganické chémie Přírodovědecké fakulty Univerzity Karlov, Albertov 6, 128 43, Praha 2, ČR; micka@prfdec.natur.cuni.cz*

Anorganicko-organické hybridné zlúčeniny sa vy-značujú obrovskou rozmanitosťou zloženia, ktorá vedie k výraznej štruktúrnej variabilite, z čoho vyplývajú ich rozmanité fyzikálne vlastnosti.Vanád je v týchto zlúčeninách prítomný v podobe oxovanadičnanových aniónov $\{V_xO_y\}^n$, ktoré môžu v štruktúrach tvoriť izolované jednotky, reťazce, alebo 2D- vanádo-kyslíkové skelety. Organické častice hrajú významnú úlohu pri tvorbe komplexov z atómom ďalšieho prechodného kovu prítomného v zlúčenine, ako aj pri tvorbe štruktúry anorganicko-organických hybridných zlúčenín [1].

Zlúčeniny pripravené na našom pracovisku obsahujú oxovanadičnanový anión, atómy Cu(II), Co(II), Ni(II), Fe(II) a organické dusíkaté látky: fenantrolín *(phen)*, bipyridyl (*bpy*) a nikotínamid (*na*). Ich zloženie a štruktúrna charakterizácia oxovanadičnanového aniónu je v tab.1.

Zaujímavé štruktúrne rysy sa zistili aj pri supramolekulovej architektúre týchto látok, kde hrajú významnú úlohu vodíkové väzby a π-π interakcie paralelných fenantrolínových kruhov.

[1] P.J.Hagrman, R.C. Finn, J. Zubieta, Solid State Sciences 3, 754 (2001).
[2] Ľ. Žúrková, R. Kucsera, R. Gyepes, M. Sivák, Monatsh Chem 134, 1071 (2003).
[3] R.Kucsera, R. Gyepes, Ľ. Žúrková, Cryst. Res. Technol. 37, 890 (2002).
[4] R.Kucsera, R. Gyepes, Ľ. Žúrková, Solid State Phenom. 90-91, 329 (2003).
[5] E. Rakovský, D. Joniaková, R. Gyepes, P. Schwendt, Z. Mička, Cryst. Res. Technol. 7, 719

Tabuľka 1. Zloženie a štruktúrna charakterizácia oxovanadičnanového aniónu

Č.	Zloženie	Charakterizácia $\{V_xO_y\}^{n-}$	Lit.
1-4	$[M(phen)_3]_2V_4O_{12} \cdot phen \cdot 22H_2O$ (M = Co, Ni, Cu, Fe)	$V_4O_{12}^{4-}$ izolovaná štruktúrna jednotka	[2]
5	$[Co(phen)_2]_2V_4O_{12} \cdot H_2O$	$V_4O_{12}^{4-}$ μ^2_2 - mostík	[3]
6	$[Ni(phen)_2]_2V_4O_{12} \cdot 7H_2O$	$V_4O_{12}^{4-}$ izolovaná štruktúrna jednotka	[4]
7	$[Cu_2(phen)_4V_4O_{12}] \cdot 4H_2O$	$V_4O_{12}^{4-}$ μ^1_2 - mostík	
8	$[Cu_2(phen)_4V_4O_{12}] \cdot 6H_2O$	$V_4O_{12}^{4-}$ μ^2_2 - mostík	
9	$[Cu_2(phen)_4(VO_3)_4] \cdot 11H_2O$	$(VO_3)_n^{n-}$ reťazec	
10-11	$[M(na)(H_2O)(VO_3)_2]$ (M = Co, Ni)	$(VO_3)_n^{n-}$ reťazec *	
12-13	$[M_2(bpy)_3(VO_3)_4] \cdot 6H_2O$ (M = Co, Ni)	$(VO_3)_n^{n-}$ reťazec *	
14	$[Cu(phen)_2Cl]_3H_3V_{10}O_{28} \cdot 7H_2O$	$H_3V_{10}O_{28}^{3-}$ izolovaná štruktúrna jednotka	[5]
15	$[Cu_2(H_2O)(OH)_2(phen)_2][Cu_2(OH)_2(phen)_2(V_4O_{12})] \cdot 6H_2O$	$V_4O_{12}^{4-}$ μ^1_2 - mostík	

* štruktúra sa predpokladá z IČ spektier.

2P04

CYTOSTATICKY AKTIVNÍ VANADOCENOVÉ KOMPLEXY

Jaromír Vinklárek, Jan Honzíček, Hana Paláčková, Jana Holubová

Katedra Obecné a Anorganické Chemie, Fakulta Chemicko-Technologická Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií, 532 10 Pardubice, ČR, e-mail: jaromír.vinklarek@upce.cz

Předkládaný příspěvek se zabývá přípravou a studiem cytostaticky aktivních vanadocenových komplexů s ohledem na jejich cytostatickou aktivitu a možnosti jejich interakce v biologickém prostředí. Prezentované výsledky budou diskutovány ve třech navazujících celcích:

1.**Experimentální a teoretické studium vanadocendichloridu.** Výchozí sloučenina, cytostaticky aktivní vanadocendichlorid (Cp_2VCl_2), byla studována pomocí dostupných experimentálních a teoretických metod. Na základě výsledků byla, jako stěžejní metoda pro další studium v biologických systémech, vybrána EPR spektroskopie. Z výsledků EPR spekter (především parametru hyperjemného štěpení HFC) jsme totiž schopni citlivě monitorovat změny v okolí centrálního atomu vanadu. V kombinaci z výsledky kvantově chemických výpočtů můžeme navržené struktury přítomných částic potvrdit.[1]

2. **Interakce vanadocenového fragmentu s bioligandy.** Jak bylo zjištěno vanadocendichlorid po vnesení do vody okamžitě odštěpuje oba chloridové ligandy za vzniku stabilního $[Cp_2V(H_2O)_2]Cl_2$ komplexu. Za fyziologických pH dochází k disociaci aqua skupin a interakci vanadocenového fragmentu $[Cp_2V]^{2+}$ s částicemi obsaženými v terapeutických a fyziologických roztocích, v roztocích krevní plasmy a plné lidské krve.[2]

3. **Příprava vanadocenových komplexů se zlepšenými terapeutickými vlastnostmi**. Jako další potenciální léčiva, s lepšími terapeutickými vlastnostmi než výchozí vanadocendichlorid, byly připraveny vanadocenové komplexy s různě modifikovanými Cp kruhy a inkluzní sloučeniny s cyklodextriny.[3]

Tato práce vznikla s podporou grantu FG 35023 Univerzity Pardubice a výzkumného záměru CZ 0021627501.

[1] J.Honzíček, J.Vinklarek, P.Nachtigall, *Chem. Phys.*, 305, 291-298 (2004).
[2] J.Vinklárek, J.Honzíček, J.Holubová, *Magn. Reson. Chem.*, 42, 870-874 (2004).
[3] J.Vinklárek, J.Honzíček, J.Holubová, *Centr. Eur. J. Chem.*, 3, 72-81 (2005).

2P05

VRSTVY UHLÍKU A JEJICH VYUŽITÍ VE TKÁŇOVÉM INŽENÝRSTVÍ

Olga Kubová, Václav Švorčík

Vysoká škola Chemicko-technologická, Technická 5, 16628 Praha 6-Dejvice

Polymerní materiály se v poslední době používají i ve tkáňovém inženýrství. V současnosti se v medicínské praxi aplikují pro náhradu cév [1], parenchymatických orgánů [2] či jako nosiče při kultivacích kožního krytu [3]. V této práci byl studován vliv deponované vrstvy uhlíku na polymer a jejich biokompatibilita. Pro experimenty byly použity fólie polyethylenterfalátu (PET) a polytetrafluorethylenu (PTFE). Pro přípravu povrchových uhlíkových filmů na uvedených polymerech byla využita metoda CVD (chemical vapour deposition) s použitím Xe_2 excimerové lampy v atmosféře acethylenu. Připravené uhlíkové vrstvy byly charakterizovány následujícími metodami: AFM mikroskopie (povrchová morfologie), Ramanova spektroskopie (chemická struktura) a goniometrie (povrchová polarita). Pro měření tloušťky filmů byla použita SEM mikroskopie a profilometr. Dále byla testována chemická stabilita připravených vrstev. Výsledky provedených experimentů potvrdily, že uhlíkové filmy připravené touto metodou mají charakter amorfního hydrogenovaného uhlíku. Na takto povrchově modifikovaných fóliích byla *in vitro* studována adheze a proliferace HUVEC (human umbilical vein endothelial cells) buněk. Získané výsledky ukázaly, že v případě PTFE je optimální doba depozice 20 min. V případě PET je optimum pro proliferaci HUVEC buněk při delší době depozice (30 min). Výsledky všech experimentů potvrzují pozitivní vliv povrchové úpravy u obou polymerů na jejich biokompatibilitu. Výraznější pozitivní vliv je patrný u PTFE.

Poděkování: Autoři děkují za finanční podporu GAČR z projektu č. 106/03/0514 a GA AVČR z projektu č. A 5011301.

[1] Greisler H.P., Tattersaal C.W., Klosak J.J., Cabusao E.A., Garfield J.D., Kim D.U.: Surgery 110, 645 (1991)
[2] Bačáková L., Mareš V., Bottone M.G., Pellicciari C., Lisá V., Švorčík V.: J.Biomed. Mater. Res. 49, 369 (2000)
[3] Švorčík V., Kubová O., Slepička P.,Dvořánková B.,Macková A.,Hnatowicz V.: J.Mater.Sci.Mater.Med., přijato

2P06
TIOKYANÁTO-ŽELEZITÉ A ŽELEZNATÉ KOMPLEXY

Iveta Ondrejkovičová[a], Jozef Malo[a], Silvia Galková[a], Tadeusz Lis[b]

[a]*Katedra anorganickej chémie, FCHPT, Slovenská technická univerzita, Radlinského 9, 812 37 Bratislava*
[b]*Fakulta chémie, Vroclavská univerzita, 14 F. Joliot-Curie, 50-383 Vroclav, Poľsko*
e-mail: iveta.ondrejkovicova@stuba.sk

V komplexných zlúčeninách sa tiokyanatanový anión vyznačuje veľkou koordinačnou schopnosťou a variabilitou väzbových možností. Pri analýze väzbových možností tiokyanáto-liganda v komplexoch železa sme vychádzali z údajov monokryštálovej röntgenovej štruktúrnej analýzy vyše 160 komplexov [1]. Komplexy môžeme rozdeliť na jednojadrové (134 zlúčenín) a viacjadrové (homo- a heteronukleárne). Tiokyanatanová skupina je viazaná na atóm Fe jednofunkčne (Fe-NCS alebo Fe-SCN) alebo mostíkovovo ako bidentátny (Fe-NCS-M) alebo tridentátny ligand (Fe-NCS=M_2). Oxidačné čísla atómu Fe v týchto zlúčeninách sú I - III, pričom prevláda II (75 %). Z analýzy vyplýva, že NCS- skupina je viazaná na atóm železa prevažne koncovo atómom dusíka. Oxidačné číslo I ako aj koordinácia atómom síry je veľmi zriedkavá. Najpočetnejšou skupinou sú jednojadrové komplexy (~85 %) s koordinačným číslom 6; čísla 7, 5 sú menej obvyklé a číslo 4 sa nachádza len v jednej zlúčenine so známou štruktúrou.

Nedávno sme pripravili sériu tiokyanátokomplexov železa s terciárnymi fosfán- a arzánoxidmi, ktoré boli charakterizované elementárnou analýzou, infračervenými spektrami a komplex $[Fe(NCS)(OAsPh_3)4][Fe(NCS)_4]\cdot EtOH$ aj RTG štruktúrnou analýzou (ortorombický, Pna2(1), a = 28,424(4), b=16,016(3), c=16.215(3)Å, $\alpha=\beta=\gamma=90^o$, Z = 4). Pozoruhodné je, že atómy železa v tejto zlúčenine majú zriedkavé koordinačné čísla, t.j. 5 a 4.

[1] F. H. Allen, The Cambridge Structural Database: a quarter of a million crystal structures and rising, *Acta Cryst. B38*, 380-388 (2002)

2P07
SYNTHESIS, SPECTRAL PROPERTIES AND CRYSTAL STRUCTURES OF COPPER(II) PYRIDINEDICARBOXYLATE ADDUCTS WITH CHELATING LIGANDS

Peter Segľa, Dušan Mikloš, Jana Jašková, Marian Koman, Milan Melník

Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak Technical University, 812 37 Bratislava, Slovak Republic, E-mail: peter.segla@stuba.sk

It is known that pyridinecarboxylate ligands can exhibit various modes of coordination to a central atom. Synthesis, spectral and magnetic properties, antimicrobial effects and crystal structures of various complexes $CuX_2\cdot nH_2O$ (where X are nicotinate (nic), isonicotinate (isonic), 2,6-dimethoxynicotinate (2,6-$(MeO)_2$nic) or 2-methylthionicotinate (2-MeSnic); n = 0-4) as well as their molecular adducts with chelating ligands ethylenediamine (en), bipyridine (bipy) or diethylenetriamine (dien) have been reported in our previous papers[1-3].

In this paper we describe synthesis, spectral properties and crystal structure of 2,6-pyridine-dicarboxylate (2,6-pydca) complexes $[Cu(pdca)(H_2O)_2]$ (**I**), $\{[Na(H_2O)_2][Cu(2,6\text{-pydca})(2,6\text{-pydcaH})]\cdot H_2O\}n$ (**II**), $[Cu(en)_2][Cu(2,6\text{-pydca})_2]\cdot 2H_2O$ (III), $\{[Cu(en)_2(H_2O)_2][Na(H_2O)_5]_2[Cu(2,6\text{-pydca})_2]_2\}$ (**IV**), $\{[Cu(bipy)_2][Cu(2,6\text{-pydca})_2]_2\}$ (**V**), $[Cu(bipy)_2][Cu(2,6\text{-pydcaH})_2(NO_3)_2]\cdot 4H_2O$ (VI) and $[Cu(2,6\text{-pydca})(dien)].5H_2O$ (VII). The infinite chains of 2D polymeric complex **II** are formed by $[Cu(2,6\text{-pydca})(2,6\text{-pydcaH})]^-$ and $[Na(H_2O)_2]^+$ units which are linked together through the oxygen atoms of carboxylate groups. The molecular structure of ionic complex **IV** consists of one centrosymmetrical, tetragonal-bipyramidal cation $[Cu(en)_2(H_2O)_2]^{2+}$ and two highly distorted octahedral anions $[Cu(2,6\text{-pydca})_2]^{2-}$. The charge balance is achieved with two sodium cations surrounded by five water molecules. On the other hand, the molecular structure of complex **V** consists of binuclear units formed by trigonal bipyramidal $[Cu(bipy)_2]^{2+}$ and $[Cu(2,6\text{-pydca})_2]^{2-}$ units linked together through the oxygen atoms of carboxylate groups. The above complexes exhibit various modes of coordination of pyridinecarboxylate.

Present work has been financially supported by the Grant Agency of the Slovak Republic (Grant No. 1/2452/05) and Technology Assistance Agency under the contract No. APVT-20-005504.

[1] Palicová M., Segľa P., Mikloš D., Kopcová M., Melník M., Dudová B., Hudecová D., Glowiak T.: *Polyhedron*, *19*, 2689 (2000).
[2] Mikloš D., Segľa P., Palicová M., Kopcová M., Melník M., Valko M., Glowiak T., Korabik M., Mrozinski J.: *Polyhedron, 20*, 1867 (2001).
[3] Segľa P., Mikloš D., Olejníková P., Kaliňáková B., Hudecová D., Palicová M., Švorec J., Valko M., Melník M., Glowiak T.: *Inorg. Chim. Acta, 357*, 4172 (2004).

2P08

ŠTRUKTÚRA A VLASTNOSTI NITROBENZOÁTOMEĎNATÝCH KOMPLEXOV S RONIKOLOM

P. Stachová[a], M. Korabik[c], M. Koman[a], M. Melník[a], J. Mrozinski[c], M. Mazúr[b], D. Valigura[a]

[a]Katedra Anorganickej Chémie,FCHPT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
[b]Katedra Fyzikálnej Chémie,FCHPT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
[c]Department of Chemistry, Univerzity of Wroclaw, 50-383 Wroclaw, Poland

Štúdiom prípravy a vlastností nitrobenzoatomeďnatých komplexov s ronikolom sa realizuje v rámci systematického štúdia meďnatých komplexov s biologicky aktívnymi ligandami. Boli pripravené a študované komplexy zloženia $Cu(2\text{-}NO_2bz)_2(ron)_2(H_2O)_2$, $Cu(3\text{-}NO_2bz)_2(ron)_2$, $Cu(3,5\text{-}(NO_2)_2bz)_2(ron)_2$ a $Cu(4\text{-}(NO_2bz)_2(ron)_2$ (ron = ronikol, 2-NO_2bz = 2-nitrobenzoátový, 3-NO_2bz = 3-nitrobenzoátový, 3,5-$(NO_2)_2$bz = 3,5-dinitrobenzoátový a 4-NO_2bz = 4-nitrobenzoátový anión). Pripravené látky boli charakterizované elementárnou analýzou, elektrónovou, infračervenou a EPR spektroskopiou. Komplexom $Cu(2\text{-}NO_2bz)_2(ron)_2(H_2O)_2$ a $Cu(3,5\text{-}(NO_2)_2bz)_2(ron)_2$ bola meraná magnetická susceptibilita v teplotnom intervale 1,8 až 300 K. Látkam $Cu(2\text{-}NO_2bz)_2(ron)_2(H_2O)_2$, $Cu(3\text{-}NO_2bz)_2(ron)_2$ a $Cu(3,5\text{-}(NO_2)_2bz)_2(ron)_2$ bola vyriešená aj kryštálová štruktúra.

Komplex obsahujúci 2-nitrobenzoátový anión vykazuje netypickú štruktúru molekulového typu. Molekula pozostáva z jednotiek $[Cu(2\text{-}NO_2bz)_2(ron)_2(H_2O)_2]$ čo je vôbec prvým príkladom molekulového komplexu. Ostatné komplexy majú typickú polymérnu štruktúru $[Cu(X\text{-}(NO_2bz)_2(ron)_2]n$. Patria do skupiny komplexov s reťazcovou štruktúrou, kde atómy medi sú premostené dvomi molekulami ronikolovu. Spektrálne a magnetické vlastnosti sú v dobrej zhode s vyriešenou štruktúrou.

[1] P. Stachová, D. Valigura, M. Koman, T. Glowiak, *Acta Cryst, E61*, m994-m996, (2005).
[2] P. Stachová, et.al., *Advanced in Coordination and Bioinorganic and Inorganic Chemistry*, 386-392, (2005).

2P09

BENZOÁTO A SALICYLÁTOMEĎNATÉ KOMPLEXY - ŠTRUKTÚRA, VLASTNOSTI A ICH PRESPEKTÍVY

D. Valigura, P. Stachová, M. Koman, D. Mikloš, M. Melník, D. Hudecová[a], M. Miko[a]

Katedra anorganickej chémie, FCHPT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava,
[a]Katedra biochémiea mikrobiológie, FCHPT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislav
e-mail - dusan.valigiura@stuba.sk

V rámci systematického štúdia prípravy a vlastností meďnatých komplexov sa venovala pozornosť príprave a vlastnostiam rôzne substituovaných benzoátov a salicylaátov meďnatých ako aj ich komplexom s dusíkatými ligandami - nikotínamid, dietylnikotínamid, ronikol a jeho polohové izoméry 2-pyridylkarbinol a 4-pyridylkarbinol. Pripravené komplexy boli charakterizované elementárnou analýzou a dostupnými spektrálnymi metódami (elektrónové spektrá, spektrá v infračervenej oblasti a EPR spektrá), prípadne im bola vyriešená aj kryštálová štruktúra ak sa získali kryštály vhodné pre jej riešenie. Uceleným sériam látok (halogénsalicyláty, nitrobenzoáty meďnaté a ich komplexy s nikotínamidom) bola skúmaná aj ich antifungálna, antimikrobiálna aktivita a u vybraných komplexov sa študovali aj niektoré ďalšie aktivity (vplyv na biosyntézu proteínov a nukleových kyselín, prípadne citostatická aktivita). Získané výsledky v štúdiu bioaktivity sa dávajú do súvisu so zložením a štruktúrou pripravených komplexov. Z hľadiska bioaktivity skúmaných komplexov treba na základe poznatkov o aktivite nitrobenzoátomeďnatých komplexov poznamenať, že vopred nie je možné vylúčiť, alebo predpokladať mieru aktivity pripravených komplexov, ale je nutné údaje o tejto aktivite a faktoroch, ktoré ju ovplyvňujú experimentálne získavať.

2P10

THE STRUCTURAL STUDY OF SELECTED COPPER(II) CARBOXYLATES WITH TRIDENTATE CHELATING LIGANDS

Marian Koman, Milan Melník

Department of Inorganic Chemistry, Slovak Technical University, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovak Republic, e-mail: marian.koman@stuba.sk

It is well known that some metals have in biological systems antimicrobial and antifungal activities and copper is not exception. The copper(II) carboxylates have been the subject of numerous investigations, especially with nitrogen donor ligands. Some carboxylic acids and their derivatives also play an important role in biological processes. In order to better understand some aspects of copper(II) atom - drug interaction, we have studied here the complexation of some bioactive ligands.

We prepared over three hundred new Cu(II) carboxylates with biological active ligands. Different coordination

modes of the carboxylato group leads to the formation of mononuclear, binuclear and polynuclear structures. Based on the previous series of crystal structures of copper(II) carboxylates, these were classified into several structural types.

The interesting type is forms by a tridentate ligands such as 2,6-dimethanolpyridine and 2,6-dicarboxylicpyridine acid. These ligands created a several different types of compounds with Cu(II), in which Cu - O bond distances range from 1.897(3) to 2.433(2)Å and Cu - N from 1.889(2) to 2.083(3)Å. There is an interrelation between the Cu - L bond distances and L - Cu - L bond angles, which will be discussed.

Observed data are discussed and correlated with those familiar found in Cambridge Crystallographic Data Base.

Present work has been financially supported by the Grant Agency of the Slovak Republic (Grant No. 1/2452/05) and Technology Assistance Agency under the contract No. APVT-20-005504.

2P11

ZACHYCOVÁNÍ Cs NA BENTONITECH - ADSORPCE NEBO IONTOVÁ VÝMĚNA?

Zdeněk Klika[a], Lukáš Kraus[a], Dušan Vopálka[b]

[a]*Katedra analytické chemie a zkoušení materiálu, Vysoká škola báňská - Technická univerzita Ostrava, 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava - Poruba, Česká republika,*
[b]*Katedra jaderné chemie, České Vysoké Učení Technické, Břehová 7, 115 19 Praha 1, Česká Republika*
zdeněk.klika@vsb.cz

Jíly a některé jílové minerály patří mezi nejčastěji navrhované barierové materiály používané pro zachycování Cs z podzemních vod. Z tohoto důvodu se této problematice věnuje velká pozornost. Tato práce je zaměřena na zachycování Cs z relativně koncentrovaných roztoků CsCl na Ca-bentonit z lokality Obrnice. Vzorek bentonitu obsahuje kromě křemene, kalcitu, goethitu, anatasu a apatitu asi 45% Ca-montmorillonitu, na kterém v podstatné míře dochází k záchytu Cs^+ iontů. „Adsorpční isotermy“ byly naměřeny za použití vsádkové metody. Z experimentálních dat vyplynulo, že zatímco zředěné bentonitové suspenze s hodnotou m/V cca 0.0025 g/cm^3 (kde m je hmotnost bentonitu, V objem roztoku CsCl) velmi dobře vyhovují Langmuirově isotermě, u koncentrovanějších suspenzí dochází k podstatnému snižování maximálně absorbovatelného množství Cs (Q_{max}). V prvním případě (m/V cca 0.0025 g/cm^3) je hodnota Q_{max} rovná 0,500 mmol Cs/g, při m/V = 0,07 g/l je hodnota Q_{max} snížena až na 0,200 mmol Cs/g.

Naměřené isotermy pro hodnoty m/V v intervalu od 0,0025 do 0,070 g/cm^3 byly testovány na shodu s modely: *a) dvojité Langmuirovy izotermy, b) iontové výměny, c) empiricky upravené Langmuirovy izotermy*. Z porovnání metod a) a b) vyplynulo, že experimentální data daleko lépe souhlasí s mechanismem iontové výměny ($2\ Cs^+ \leftrightarrow Ca^{2+}$) v porovnání s mechanismem dvojité adsorpce (Cs^+ a Ca^{2+} iontů). Koeficienty korelace mezi experimentálně stanovenými hodnotami zachyceného Cs na bentonitu (Q_{exp}) a vypočtenými hodnotami Q_{calc} jsou: z modelu a) 0,871, z modelu b) 0,988 a z modelu c) 0.992. Výsledky ukazují, že zachycování Cs^+ iontů z roztoku na bentonitu lze spíše považovat za iontovou výměnu než za adsorpci.

2P12

SMĚSNÉ OXIDY PŘIPRAVENÉ TEPELNÝM ROZKLADEM Co-Mn-Al HYDROTALCITŮ A JEJICH KATALYTICKÉ VLASTNOSTI

František Kovanda[1], Tomáš Rojka[1], Květa Jirátová[2], Lucie Obalová[3], Tomáš Grygar[4]

[1] *Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav chemie pevných látek, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika, Frantisek.Kovanda@vscht.cz*
[2] *Ústav chemických procesů AV ČR, Rozvojová 135, 165 02 Praha 6, Česká Republika, jiratova@icpf.cas.cz*
[3] *Vysoká škola báňská - Technická univerzita Ostrava, Katedra fyzikální chemie a teorie technologických procesů, 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava, Česká republika, lucie.obalova@vsb.cz*
[4] *Ústav anorganické chemie AV ČR, 250 68 Řež, Česká republika, grygar@iic.cas.cz*

Sloučeniny typu hydrotalcitu (podvojné vrstevnaté hydroxidy) se často používají jako prekurzory při přípravě katalyzátorů na bázi směsných oxidů. Srážecí reakcí byla připravena řada prekurzorů s molárním poměrem kationtů Co:Mn:Al měnícím se od 4:2:0 do 4:0:2. S využitím metod termické analýzy, práškové rentgenové difrakční analýzy měřené in situ a Ramanovy spektroskopie byl sledován tepelný rozklad prekurzorů a změny fázového složení kalcinačních produktů v teplotním rozmezí 200 - 1100 °C. Všechny prekurzory se rozkládaly při 200 - 300 °C za vzniku směsných oxidů se spinelovou strukturou, v produktech kalcinovaných při teplotách nad 900 °C byl zjištěn CoO jako další fáze. S rostoucí kalcinační teplotou se zvyšoval obsah krystalické fáze ve vzorcích a zvětšoval se mřížkový parametr vzniklých spinelů. Ramanova spektroskopie prokázala měnící se složení spinelů v závislosti na teplotě, kdy primárně vznikal Co_3O_4, který se postupně rozpouštěl ve spinelech s nižším obsahem Co. Z prekurzorů byly kalcinací při 500 °C připraveny katalyzátory, které byly charakterizovány metodami TPR, TPD a XPS. Aktivita katalyzátorů byla sledována při spalování těkavých organických látek (toluenu a ethanolu) a při rozkladu N_2O. Při rozkladu N_2O bylo dosaženo nejvyšších konverzí na katalyzátoru s molárním poměrem Co:Mn:Al = 4:1:1, který obsahoval optimální množství redukovatelných složek.

Tato práce vznikla s finanční podporou MŠMT ČR (VZ č. MSM 6046137302 a 6198910016) a GA ČR (granty č. 104/04/2116 a 106/05/0366).

2P13

STABILITA FOREM ARSENU V ČISTÝCH A KONTAMINOVANÝCH ZEMINÁCH

Doušová B.[1], Filippi M.[2], Martaus A.[1], Koloušek D.[1], Machovič V.[1]

[1] Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, ČR
[2] Geologický ústav AV ČR, Rozvojová 135, 165 02 Praha 6, ČR, E-mail: Barbora.Dousova@vscht.cz

Sloučeniny arsenu (především jeho anorganické formy) jsou škodlivé pro většinu biotopů a z hlediska toxicity se řadí mezi látky trvale nebezpečné. Arsen patří mezi metaloidy a jeho anorganické sloučeniny se vyskytují především jako anionty, proto se chemismem, adsorpčními vlastnostmi a mineralogií výrazně liší od toxických kovů kationtové povahy (Zn, Cd, Hg, Pb).

Schopnost půdy akumulovat sloučeniny arsenu vede ke vzniku koncentračních gradientů uvnitř půdních profilů. Dochází k infiltraci srážkové vody, akumulaci arsenu ze srážkových i spodních vod, a následně k jeho uvolňování do podzemních vod a biogeochemických cyklů. Adsorpční kapacita půd vůči arsenu závisí primárně na obsahu hydratovaných oxidů železa a hliníku, přítomnosti rozpuštěných organických látek a změnách pH, které ovlivňují rozdělení náboje na povrchu pevné fáze[1].

Sekvenční extrakcí vzorků kontaminovaných půd bylo stanoveno pět základních anorganických forem arsenu lišících se stabilitou a vazebnými vlastnostmi v půdním profilu [2]. Nespecificky a slabě vázané arsenové speciace zaujímaly 0.1 až 0.8 % z celkového obsahu As; specificky vázané formy As - arseničnany ve výměnných pozicích s reaktivnějšími isosterickými anionty (fosfáty) se představovaly jednotky %; obsah arsenových speciací vázaných bidentátovými vazbami na oxidy hydroxidy a hydratované oxidy Fe a Al za vzniku vnitřních komplexů [3] se pohyboval od 20 do 50 % pro amorfní nebo slabě krystalickou pevnou fázi a od 45 do 80 % pro dobře krystalické formy oxidů hydroxidů Fe a Al. Zbytkový As vázaný v silikátové struktuře se prakticky nevyskytoval. Vyšší obsahy As vázaného v krystalické formě souvisely s přítomností sekundárních arsenových minerálů v přirozeně kontaminovaných půdách.

Poměrné zastoupení sledovaných forem As nezávisí na celkovém obsahu As, ale pouze na charakteru a historii půdního profilu.

[1] Davis, C.C. et al.: *Environ. Sci. Technol., 35*, 2158-2162 (2001).
[2] Wenzel, W.W. et al.: *Analytica Chimica Acta, 436*, 309-323 (2001).
[3] Randall, S.R. et al.: *Geochim. Cosmochim. Acta 65 (7),* 1015-1023 (2001).

2P14

ANORGANICKO-ORGANICKÉ VRSTVY NA SKLE

Petra Novotná, Josef Krýsa

Ústav anorganické technologie, VŠCHT Praha, Technická 5, 16628 Praha 6, e-mail: petruska.novotna@vscht.cz

Průmyslová výroba a použití materiálů připravovaných metodou sol-gel potvrzuje, že stále se zvyšující požadavky na kvalitu a vlastnosti některých výrobků vedou k nutnosti využívat nové typy materiálů a tím i nové postupy jejich přípravy. Metoda sol-gel je jednou z nich. Krátce ji lze charakterizovat jako nízkoteplotní způsob přípravy skelných a sklokrystalických materiálů cestou chemické polymerace.

Jedním z výrazných trendů v současné přípravě vrstev metodou sol-gel je příprava fotoaktivních vrstev. Jako fotoaktivní materiál se nejčastěji používá TiO_2 ve formě anatasu. Jak ale ukázaly pokusy v této oblasti, přítomnost anatasu v tenkých vrstvách připravovaných metodou sol-gel je jednou z významných, ale ne dostačujících podmínek pro získání aktivních vrstev.

Předkládaná práce se zabývá přípravou a porovnáním vybraných vlastností vrstev o složení TiO_2, polydimethylsiloxan (PDMS)/TiO_2 a PDMS/TiO_2/SiO_2. SiO_2 byl do vrstev dodán z důvodu zvýšení jejich chemické odolnosti. Tloušťka připravených vrstev se pohybovala od 100 nm (vrstvy čistého TiO_2) do 1 km (vrstvy systému PDMS/TiO_2/SiO_2). Hlavní důraz byl kladen na zjištění jejich fotoaktivity (statické testy odbourávání methylenové modře z vodného roztoku) a chemické odolnosti (statické testy prováděné ve vodě při 85 °C). Ukázalo se, že připravené vrstvy, jež obsahovaly pouze TiO_2 ve formě anatasu, nevykazovaly žádnou fotoaktivitu. Ta byla do systému zanesena až přidáním organické složky (polydimethylsiloxanu - PDMS). Zároveň bylo zjištěno, že rychlost fotodegradace je závislá na teplotě výpalu vzorků a množství titaničitého prekurzoru ve výchozí směsi.

Tento příspěvek byl vypracován za finanční podpory MŠMT ČR (projekt č. 1M0577).

2P15

PŘÍMÉ SLEDOVÁNÍ KINETIKY RŮSTU KRYSTALŮ Sb_2S_3 VE SKLOVITÉ MATRICI $(GeS_2)_{0.2}$ $(Sb_2S_3)_{0.8}$

Daniel Švadlák, Jiří Málek

Katedra fyzikální chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. Legií 565, 53210 Pardubice, Česká republika. E-mail: daniel.svadlak@upce.cz

Pomocí optického mikroskopu Olympus BX60 v režimu odraženého světla byla sledována krystalizace ortorhombické formy Sb_2S_3 (stibnit) v pseudobinárnim skelném systému $(GeS_2)_{0.2}$ $(Sb_2S_3)_{0.8}$. Amorfnost výchozího mate-

riálu a vznikající krystalická fáze byla ověřena a potvrzena pomocí rentgenové difrakční analýzy. Složení sklovité matrice bylo ověřeno pomocí elektronové skenovací mikroskopie. Měření růstu krystalů byla provedena v rozsahu teplot 252 °C až 282.5 °C za izotermních podmínek na vzorcích připravených v podobě tenkých leštěných destiček. Pomocí optického mikroskopu byla sledována časová závislost růstu krystalické fáze ve sklovité matrici. Bylo prokázáno, že tyto závislosti jsou lineární v celém oboru sledovaných teplot. Rychlosti růstu krystalů určené ze směrnic časových závislostí odpovídají hodnotám 0.06 až 2.25 Ķm.min^{-1}. Aktivační energie růstu ortorhombické formy Sb_2S_3 činí 296 ≤ 3 kJ.mol^{-1}. Velikost aktivační energie bude diskutována s ohledem na průběh teplotních závislostí viskozity v oblasti podchlazené kapaliny a na komplementární měření kinetiky krystalizace metodami termické analýzy.

Práce byla uskutečněna za podpory výzkumného záměru Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky č. 3340/22/CZ351002.

2P16

TVORBA MIKRO- A NANOSTRUKTUR V AMORFNÍCH CHALKOGENIDECH A APLIKACE JEVU

Miroslav Vlček[1], Sigmund Schroeter[2], Alena Fišerová[1], Ruediger Poehlmann[2]

[1] *Katedra obecné a anorganické chemie, FCHT Univerzita Pardubice, 53210 Pardubice, ČR*
[2] *Institute for Physical High Technology, Jena 07745, Germany*
Miroslav.Vlcek@upce.cz

Práce shrnuje výsledky studia tvorby mikro- a nanostruktur v tenkých vrstvách (300 - 1000 nm) chalkogenidů As a Ge. Mikrostruktury byly vytvářeny expozicí přes Cr masku (halogenová lampa), holograficky (Ar laser, 488 nm) a přímým zápisem (DUV litograf DWL 66-UV, 244 nm). Nanostruktury byly do vrstev zapisovány na elektronovém litografu LION LV1. Expozicí zářením ve VIS (halogenová lampa, Ar laser) docházelo k fotostrukturálním změnám ve vrstvách chalkogenidů. Ty byly spojeny se změnami hodnoty optické šířky zakázaného pásu a indexu lomu. Výsledkem byl vznik amplitudo-fázových difrakčních prvků (holografické mřížky, mikročočková pole). Ty byly stabilizovány transformaci na reliéfní difrakční prvky s využitím jevu selektivního leptáním v alkalických roztocích. V závislosti na složení vrstev a leptací lázně byly realizovány pozitivní i negativní lepty. Selektivní leptání bylo pozorováno i při expozici UV zářením, resp. svazkem elektronů. Při vhodně zvolených podmínkách expozice UV zářením (intenzita, rychlost zápisu) byly reliéfní difrakční prvky vytvářeny v chalkogenidových vrstvách přímo během expozice, bez nutnosti dalšího zpracování. Proces selektivního leptání byl naopak nutný po expozici svazkem elektronů. Podařilo se realizovat nanostruktury s šířkou motivů menší než 100nm do hloubky 400 nm. V práci jsou diskutovány možné aplikace jevu.

Poděkování: Práce byla provedena za finanční podpory projektu MŠMT ČR 0021627501.

2P17

CHARAKTERIZACE TENKÝCH POLYMERNÍCH VRSTEV PŘIPRAVOVANÝCH METODOU SPIN COATING

T. Podgrabinski, P. Slepička, V. Švorčík

Ústav inženýrství pevných látek, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha, Tomasz.Podgrabinski@vscht.cz

Pro přípravu tenkých vrstev lze vedle mnoha tradičních technik, jako vakuové napařování, katodové naprašování, chemická a fyzikální depozice apod. použít i rotační lití - spin coating. Tato metoda je obzvláště vhodná pro přípravu tenkých polymerních filmů používaných pro optická [1] či dielektrická měření [2]. U této metody je hlavní výhodou práce v roztoku, kdy bez větších problémů lze připravované vrstvy dotovat.

Tato práce se soustřeďuje na studium dielektrických a strukturních vlastností polymetylmetakrylátu (PMMA), polystyrenu (PS) a jejich dotovaných vrstev. Polymery byly dotovány různými koncentracemi difenylsulfoxidu (DS).

Pro oba použité polymery bylo metodou DSC zjištěno, že přítomnost dopantu ve filmu polymeru vede ke snížení teploty skelného přechodu (T_g). Z kapacitních měření bylo pozorováno, že se vzrůstající koncentrací dopantu ve struktuře polymeru dochází ke zvýšení hodnoty relativní permitivity (er). Jelikož relativní nárůst hodnoty er u PMMA nabývá podstatně vyšších hodnot než u PS, lze tento jev přisuzovat synergickému efektu s vlastním (intristickým) dipólem polymeru. Zvyšování hodnoty er bylo také pozorováno po zahřátí vzorků z pokojové teploty na teplotu kolem T_g. Po ochlazení se hodnota er u vzorků na bázi PMMA vrací na svou výchozí hodnotu, u PS je pozorován pokles hodnot, což je výsledek difúze dopantu z matrice. Tato skutečnost byla potvrzena i měřením hloubkového profilu síry pomocí RBS.

Na obou systémech byly proměřeny závislosti polarizace na intenzitě elektrického pole (P-E křivky). Je patrné, že přítomnost molekul DS ve struktuře polymeru vede k vyšší polarizovatelnosti kompozitu. Tato skutečnost je patrná i při měření interakce s elektromagnetickým zářením, kdy dotace polymeru pomocí DS vede v blízké infračervené a viditelné oblasti ke změnám hodnot indexu lomu .

Autoři děkují za finanční podporu VŠCHT k vnitřnímu grantu č. 126080016/2005 a grantu GAČR č. 102/03/0449.

[1] V. Švorcik, M. Prajer, I. Hüttel, V. Rybka, V. Hnatowicz, J. Plešek, *Mat. Lett., 59*, 280-282, (2005).
[2] V. Švorčík, T. Podgrabinski, J. Náhlík, V. Rybka, V. Hnatowicz, *Mat. Lett. 59*, 341-344, (2005).

2P18

SOME PROPERTIES OF THE NOVEL DILUTED MAGNETIC SEMICONDUCTORS $Sb_{2-x}V_xTe_3$

Petr Lošťák[a], Čestmír Drašar[a], Zhenhu[a] Zhou[b], Ctirad Uher[b]

[a]Department of General and Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice, Czech Republic, Petr.Lostak@upce.cz,
[b]Department of Physics, University of Michigan, Ann Arbor, Michigan 48109, USA, cuher@umich.edu

The single crystals of $Sb_{2-x}V_xTe_3$ (x=0.0, 0.01, 0.02, 0.03) were grown by a modified Bridgman method from elements of 5N purity. The samples were characterized by measurements of the temperature dependence of the electrical resistivity, Hall coefficient, Seebeck coefficient, thermal conductivity and magnetic susceptibility in the temperature range of 2-300 K. Magnetization curves were measured too.

It was found that the vanadium-doping in the Sb_2Te_3 crystals does not change the concentration of holes. A small content of vanadium in the Sb_2Te_3 crystal lattice gives rise to ferromagnetic behavior at low temperatures; the Curie temperature T_C increases with vanadium content and reaches approximately 22 K for $Sb_{1.97}V_{0.03}Te_3$.

The incorporation of V atoms into the Sb_2Te_3 crystal results in the suppression of the values of thermal conductivity. Substracting the electronic component of thermal conductivity we obtain the lattice thermal conductivity κ_L. At low temperatures, κ_L has an approximate T^2 dependence and the data up to 100 K can be fitted well assuming that phonons scatter on boundaries, point defects, charge carriers, and other phonons.

The research was supported by Ministry of Education of Czech Republic under the project MSM 0021627501 and the NSF grant INT 0201114.

2P19

STEAM CHEMISTRY IMPACT ON MATERIALS IN POWER GENERATION

Ivo Jiříček, Hilbert Jan, Macák Jan, Vratislav Polívka*

Power Engineering Department, The ICT Prague, Technická 5, Prague 6, jiriceki@vscht.cz
**Škoda Power, s.r.o., Plzeň*

Steam produced in the boiling process is never completely pure. Contamination during power generation is caused by vaporous (virtually all solids are at least slightly soluble in steam) and mechanical carryover (moisture droplets containing dissolved solids are transferred to turbine). Operation with contaminated steam often leads to failures and forced outages.

It is the concentration of impurities that causes most of the corrosion and/or deposition problems. Turbine deposits have complex chemistry; over 150 chemical compounds have been identified at concentration from a few ppm to almost 100% and thicknesses up to few millimeters. Corrosion is often caused by salts carryover and its precipitation in LP turbine. Other source is organic matter breakdown yielding corrodents like carbon dioxide, inorganic and organic acids.

In this work the impact on materials was studied first by deposit evaluation. Turbine deposits from numerous power stations were collected and analyzed. Out of the most common constituents (silica, copper and iron oxides, ionic salts and organic matter) it is often the minor ingredients (carbonates, chlorides and sulfates) that are responsible for under-deposit corrosion in the case of wetting.

Second part of this work is aimed at the turbine integrity in the presence of corrosion media. Stress corrosion cracking and corrosion fatigue tests were performed in hot sodium chloride solution in order to find the better alternative to some commonly used materials like carbon-hardened 13% Cr blade steel (AK1).

This work was supported by research project MSM 6046137304

2P20

MOŽNOSTI A LIMITY TERMICKEJ ANALÝZY V CHÉMII MATERIÁLOV

Milan Drábik

Ústav anorganickej chémie SAV, SK-845 36 Bratislava, uachmdra@savba.sk

Cieľom príspevku je ilustrovať na dvoch príkladoch [1, 2] možnosti a limity, ktoré poskytuje moderná prístrojová technika pre termoanalytický výskum pevných látok. Prezentované príklady sú z aktuálnych oblastí výskumu cementu a betónu - MDF materiály a ich environmentálna (ne)stálosť [1], taumazit a jeho úloha v síranovej korózii betónov [2]. Termoanalytický výskum sa realizoval prístrojom T. A. I. sdt 2960. Merania sa uskutočňovali v atmosfére vzduchu alebo dusíka, využitím kombinácie rôznych teplotných profilov záhrevu boli simultánne získavané krivky TG-DTG-DTA.

Štúdium termických rozkladov MDF materiálov a týchto po vystavení vplyvu vlhkosti poskytlo kľúčové informácie o zmenách fázového zloženia ako jedného z významných prejavov druhotných reakcií, ku ktorým dochádza v uvedených systémoch účinkom H_2O a CO_2 obsiahnutých vo vzduchu. Indikatívne sú jednak nárasty obsahov hydratovaných cementových fáz a kalcitu a na druhej strane konštantné obsahy zosieťovanej fázy ako aj hydroxidu vápenatého. Výsledky potvrdili, že sieťovaná fáza je v MDF materiáloch prítomná, stabilná a zachováva si svoju úlohu aj vo vzorkách po ataku vlhkosťou.

Termický rozklad taumazitu- $[Ca_3Si(OH)_6.12H_2O](CO_3)(SO_4)$ je trojstupňový proces, pričom I. a II. stupeň úzko súvisia s rozpadom vodíkových väzieb v štruktúre tohto minerálu. Rozlíšenie I. a II. stupňa rozkladu popri výsledkoch

termickej analýzy potvrdzujú aj vypočítané charakteristiky jednotlivých vodíkových väzieb v štruktúre. Údaje získané z TG kriviek o I. stupni rozkladu sú natoľko citlivé a spoľahlivé, že bolo možné vypracovať a overiť metódu výpočtu mólového zlomku pre stanovenie obsahu taumazitu v stavebných konštrukciách napadnutých síranmi.

Poďakovanie: Autor si dovoľuje vysloviť vďaku grantovej agentúre VEGA, projekt č. 5011.

[1] M. Drábik, S.C. Mojumdar, L. Gáliková, Changes of thermal events of Macro-defect-free (MDF) cements due to the deterioration in the moist atmosphere, Cement & Concrete Research, 31, 743-747 (2001).
[2] M. Drábik, D. Tunega, S. Balkovic, V.Š. Fajnor, Computer simulations of hydrogen bonds for better understanding of the data of thermal analysis of Thaumasite, J. Therm. Anal. & Calor., zaslané do tlače.

2P21

BIOKOMPATIBILITA MODIFIKOVANÉHO POLYETHYLENU

Kateřina Kolářová, Václav Švorčík

VŠCHT, Technická 5, Praha 6, Kolarova@vscht.cz, Vaclav.Svorcik@vscht.cz

Polyethylen (PE) je často používaný materiál v mnoha medicínských aplikacích. Pro některé účely je nezbytné modifikovat povrch PE tak, aby došlo k zlepšení jeho biologických vlastností. Jde především o zvýšení polarity povrchu, zlepšení nasákavosti a o změnu povrchové morfologie, což následně vede k podpoření vzniku tenké povrchové vrstvy proteinů a tím i k zlepšení buněčné adheze [1]. Jednou z možností, jak tyto vlastnosti u polymerních materiálů podpořit je aktivace jejich povrchu v plasmovém výboji [2]. V závislosti na složení plynu, délce působení a zvoleném výkonu přispívá plasma k úpravě povrchu polymeru, k jeho ablaci, aktivaci a zesíťováním aniž by se změnily vlastnosti v objemu materiálu [3]. Toho se s úspěchem využívá nejen v medicínských aplikacích. Novým způsobem využití plasmou modifikovaného polymeru je tzv. roubování materiálu - navazování molekul, či chemických funkčních skupin na povrch materiálu. Roubování umožňuje na ozářený povrch polymeru, kde je vysoká koncentrace volných radikálů a dvojných vazeb, navázat enzymy, proteiny a jiné sloučeniny, které jsou schopny nést např. léčiva, či substráty pro chromatografickou separaci biologického materiálu. Roubováním polymerů se tak dají vytvářet materiály „na míru“, tj. materiály umožňující regulaci chování buněk přicházejících s materiálem do kontaktu.

[1] B. Dvořánková, K. Smetana R. Konigová, H. Singerová, J. Vacík, M. Jelínková, Z. Kapunková, M. Zahradník: *Biomaterials 19*, 141 (1998)
[2] M. Noeske, J. Degenhardt, S. Strudthoff, U. Lommatzsch: *International Journal of Adhesion & Adhesive 24*, 171 (2004)
[3] D. Hegemann, H. Brunner, Ch. Oehr, *NIM, B208*, (2003)

2P22

K PROTONOVÉ VODIVOSTI KYSELÝCH FOSFOREČNANŮ VYBRANÝCH ORGANICKÝCH BÁZÍ

David Havlíček, Ondřej Kaman, Zorka Macháčková

Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta UK, Albertov 6, Praha 2, Česká republika, havlicek@natur.cuni.cz, kamano@seznam.cz, zorka_m@centrum.cz

Protonová vodivost souvisí s přítomností vodíkových vazeb, resp. s jejich dynamikou a reorganizací struktury, ale mechanismus tohoto transportu protonů na dlouhou vzdálenost se u jednotlivých skupin značně liší a namnoze není v detailech objasněn. V našem příspěvku se podrobněji zabýváme tímto jevem u kyselých fosforečnanů některých organických bází, přičemž se snažíme zohlednit především strukturu látek. První studovanou sloučeinou byl monohydrát dihydrogenfosforečnanu bicyklo[2.2.2]oktanu-1,4-diazonia (2+), krystalizující v jednoklonné soustavě (C2/c) s pozoruhodnou strukturou, ve které se nacházejí dva typy fosforečnanových párů spojených krátkými (2,411 a 2,431Å) a symetrickými vodíkovými vazbami. Jeden pár odpovídá vzorci $H_3P_2O_8^{1-}$, druhý potom vyjadřuje vzorec $H_3P_2O_8^{3-}$. Tyto aniontové stavební jednotky se střídají nad sebou na dvojčetných osách symetrie. Po stanovení struktury monokrytalu rentgenograficky byla poloha vodíkových atomů upřesněna neutronovou difrakcí za normální teploty, která poukazuje na jejich symetrickou polohu. Vodivostní měření na orientovaných řezech potvrdila předpoklady o protonové vodivosti a poskytla velmi zajímavé výsledky této anizotropní vlastnosti pro různé, krystalograficky odlišné směry. Další báze, jejímiž fosforečnany jsme se zabývali, byl 1-(1-naftyl)-ethylamin překvapující tvorbou stechiometricky zcela jiné látky při přípravě jeho soli s kyselinou fosforečnou vycházející z opticky čistého izomeru a při přípravě vycházející z racemátu. První preparace poskytla 4,5 hydrát hydrogenfoforečnanu dihydrogenfosforečnanu tris[S-(-)-1-(1-naftyl)-ethylamonia(1+)], jehož jednoklonné krystaly vykazují strukturu spadající do C2 a obsahující fosforečnanový pár $H_3P_2O_8^{3-}$ s krátkou (2,454 Å) a patrně symetrickou vodíkovou vazbou. Ovšem za zcela stejných podmínek byl z racemátu získán bezvodý dihydrogenfosforečnan 1-(1-naftyl)-ethylamonia(1+) v trojklonných krystalech v P-1, který nevykazuje žádné podobné strukturní motivy obsahující krátké vodíkové vazby. Konečně jsme připravili i dihydrogenfosforečnan aminoguanidinia(1+) poskytující tři krystalové modifikace, z nichž za normální laboratorní teploty je stálá triklinická fáze se symetrií P-1. V této struktuře se objevují krátké vodíkové vazby (2,498 a 2,500 Å), které nás přivedly s ohledem na jejich uspořádání k měření vodivosti.

[1] Cihelka J.: Diplomová práce. Katedra anorganické chemie PřF UK v Praze. 2004.
[2] Chudoba V.: Disertační práce. Katedra anorganické chemie PřF UK v Praze. 2003.
[3] Kaman O., Havlíček D.: *Materials Structure*. 2005 (v tisku).

2P23

STRUKTURA A VLASTNOSTI LITHIUM-ZINEČNATÝCH BOROFOSFÁTOVÝCH SKEL

Ladislav Koudelka, Josef Jirák, Petr Mošner
Lionel Montagne, Gérard Palavit

Katedra obecné a anorganické chemie, Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická,
532 10 Pardubice, Česká Republika,
ladislav.koudelka@upce.cz

Laboratoire de Cristallochimie et Physicochimie du Solide, Ecole Nationale Supérieure
de Chimie de Lille, BP 108, 59652 Villeneuve d'Ascq Cedex, France

Byla připravena a studována směsná lithno-zinečnatá borofosfátová skla ve třech kompozičních řadách xLi_2O-(50-x)ZnO-$50P_2O_5$, xLi_2O-(50-x)ZnO-$10B_2O_3$-$40P_2O_5$ a xLi_2O-(50-x)ZnO-$20B_2O_3$-$30P_2O_5$ o složení x = 0, 10, 20, 30, 40 a 50 mol.% Li_2O. Získaná skla byla charakterizována měřením měrné hmotnosti (ρ), molárního objemu (V_M), teploty skelné transformace (T_g) a koeficientu teplotní roztažnosti (α). Pro studium změn struktury se složením skel byla použita MAS NMR spektroskopie jader ^{11}B a ^{31}P a Ramanova spektroskopie.

Při nahrazování zinečnatých iontů ionty lithnými ve studovaných sklech se mírně snižují hodnoty V_M a T_g, zatímco hodnoty a vzrůstají. U metafosfátových skel lithno-zinečnatých lze na kompoziční závislosti hodnot T_g pozorovat minimum, zatímco obdobná závislost hodnot a vykazuje maximum. Chemická stabilita lithno-zinečnatých borofosfátových skel je velmi dobrá u skel s obsahem x = 0-30 mol.% Li_2O.

Podle MAS NMR spekter u skel řady s 10 mol.% B_2O_3 bor tvoří pouze strukturní celky BO_4. U skel řady s 20mol.% B_2O_3 byla zjištěna přítomnost strukturních celků BO_3 a dvou odlišných typů BO_4 celků u skel s vysokým obsahem ZnO a pouze jednoho typu BO_4 celků u skel s vysokým obsahem Li_2O; počet strukturních celků BO_3 přitom klesá s rostoucím obsahem Li_2O, což je vysvětlováno tvorbou kovalentních vazeb P-O-Zn u skel s vysokým obsahem ZnO.

2P24

BIODEGRADABLE HOUSEHOLD MATERIALS

Attila E. Pavlath

Western Regional Research Center, Albany, California, USA

As the world population increases, we need more and more household materials for convenience. Generally, these are made from plastic because of economy and the ease of disposing them. However, they represent a major problem: most of them are not easily biodegradable, Generally it takes 200 years. In addition they are dependent on oil resources that are also needed for energy. Many of the agricultural materials could provide basis of the development of easily biodegrable materials while freeing oil for energy purposes. Unfortunately natural polymer are not easily moldable. The lecture will describe two new approaches. One is using water soluble acidic polymers that can be crosslinked by multivalent ions to ionomers after formatting them in the required formate. The other is temporary depolymerization allowing shaping and then reconstructing the stable high molecularweight form.

3P01

PŘÍPRAVA A REAKCE C_2-SYMETRICKÝCH DIBROMIDŮ

J. Kvíčala, O. Baszczyňski, D. Hořčicová

Ústav organické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika; e-mail: kvicalaj@vscht.cz

Jedním z nejúčinnějších enantioselektivních hydroboračních činidel je chirální 2,5-dimethylborolan. Při jeho přípravě se využívá Grignardova činidla na bázi 2,5-dibromhexanu, které vede ke směsi *meso*- a *rac*-2,5-dimethylborolanu. Jejich dělení pomocí aminokyselin je pracné, navíc vedlejší produkt, *meso*-isomer, je bezcenná sloučenina [1].

V nedávné době byla publikována příprava chirálních C_2-symetrických diolů pomocí enantioselektivní hydroborace 1,1'-bicyklopent-1-enu [2] nebo 3,3'-biindenu [3] isopinokamfenylboranem. Rozhodli jsme se využít této skutečnosti pro studium přípravy odpovídajících chirálních dibromidů, které by po metalaci vedly přímo k chirálním borolanům nebo silolanům.

Podle publikovaných údajů, tj. redukčním zdvojením hořčíkovým amalgamem v přítomnosti chloridu titaničitého a následnou dehydratací acetanhydridem, jsme připravili 1,1'-bicyklopent-1-en a 2,2'-biinden. Nejvhodnější metodou pro přípravu 3,3'-biindenu se naproti tomu ukázalo zdvojení indenu na 1,1'-biinden lithiací a reakcí s chloridem měďnatým a jeho následující isomerizace triethylaminem. K našemu překvapení hydroborace 1,1'-bicyklopent-1-enu isopinokamfeylboranem vedla po standardním oxidativním zpracování téměř výlučně k nežádoucímu *meso*-diolu bez ohledu na variace v reakčních podmínkách. Následující studie hydroborací tří připravených dienů různými činidly, boranem, isopinokamfeylboranem, diisopinokamfeylboranem, thexylboranem a 9-BBN poskytla pouze v případě kombinace 3,3'-biindenu a thexylboranu výlučně žádaný racemický (1R*,1'R*,2S*,2'S*)-1,1'-biindan-2,2'-diol bez příměsi nežádoucí mesoformy. Bromací diolu bromidem fosforitým nebo směsí tetrabrommethanu s trifenylfosfanem jsme získali racemický (1R*,1'R*,2R*,2'R*)-2,2'-dibrom-1,1'-biindan, který byl transformován reakcí s hořčíkem v diethyletheru na odpovídající organohořečnatou sloučeninu. Její reakce s trichlorsilanem nebo dichlor(diethylamino)-boranem vedla k žádanému substituovanému silolanu a borolanu.

Děkujeme Grantové agentuře České republiky (Grant č. 203/03/0496) a Ministerstvu školství České republiky (Projekt č. MSM223100001) za finanční podporu tohoto projektu.

[1] S. Masamune, B. M. Kim, J. S. Petersen, T. Sato, S. J. Veenstra, *J. Am. Chem. Soc. 107*, 4549-4551, (1985).
[2] G. Zhu, P. Cao, Q. Jiang, X. Zhang, *J. Am. Chem. Soc.* 119, 1799-1800, (1997).
[3] X. Yang, J. Shen, C. Da, H. Wang, W. Su, D. Liu, R. Wang, M. C. K. Choi, A. S. C. Chan, *Tetrahedron Lett.* 42, 6573-6575, (2001).

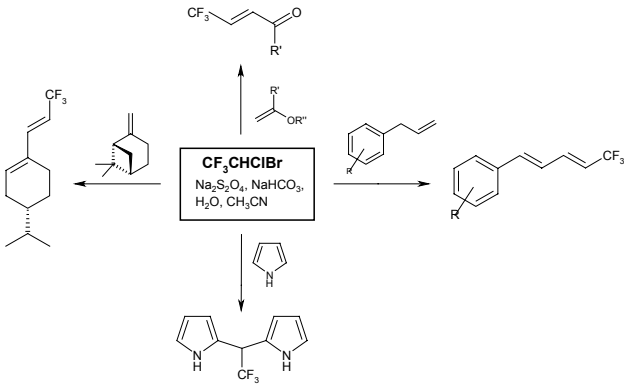
3P02

THE APPLICATION OF HALOTHANE AND SODIUM DITHIONITE TO THE SYNTHESIS OF COMPOUNDS CONTAINING THE TRIFLUOROMETHYL GROUP

Wojciech Dmowski

Institute of Organic Chemistry, Polish Academy of Sciences, 44 Kasprzaka St., 01-224 Warsaw, Poland, dmowski@icho.edu.pl

1-Bromo-1-chloro-3,3,3-trifluoroethane has long been known under the name of Halothane® as an inhalation anesthetic. This inexpensive, commercially available and easy to handle compound met, however, only a few synthetic applications. The results of our work have shown that, when subjected to „sulfinatodehalogenation" procedure with sodium dithionite as a free radical initiator [1], Halothane is a versatile reagent to the synthesis of numerous compounds containing the trifluoromethyl group [2-4].



[1] Huang, W.Y.; Huang, B.N.; Hu, C.M. *J.Fluorine Chem.*, 58, 1 (1992)
[2] Plenkiewicz, H.; Dmowski, W.: Lipiński, M., *J.Fluorine Chem.*, , 111, 227 (2001).
[3] Dmowski, W.; Piasecka-Maciejewska, K.: Urbańczyk-Lipkowska., *Synthesis*, 841 (2003).
[4] Dmowski, W.; Ignatowska, J.; Piasecka-Maciejewska, K., J.*Fluorine Chem.*, 125, 1147. (2004).

3P03

VLIV PŘÍTOMNOSTI NEKORESPONDUJÍCÍCH AMINŮ NA KINETIKU HYDROGENACE NITRILŮ

Zdeněk Severa, Jiří Krupka

Ústav organické technologie, Vysoká škola chemicko - technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6 Zdenek.Severa@vscht.cz

Hydrogenace nitrilů patří k významným metodám průmyslové přípravy řady důležitých aminů. Hydrogenace nitrilů je komplikovanou soustavou následných a bočných

reakcí. V závislosti na reakčních podmínkách a zejména pak v závislosti na použitém katalyzátoru, převládají v produktu hydrogenace primární, sekundární nebo terciární aminy. Kromě hydrogenace nenasycených vazeb mohou v systému probíhat reakce kondenzační, eliminační, hydrogenolytické a na Co nebo Ni katalyzátorech i reakce izomerační. Předkládaná práce je věnována detailnímu studiu jednotlivých reakčních kroků, které dodnes nejsou dostatečně vysvětleny. K jejich objasnění byla prováděna kinetická studie hydrogenace samotných nitrilů a následně i hydrogenace nitrilů v přítomnosti primárních, sekundárních a terciárních aminů s alkyly odlišnými od alkylu hydrogenovaného nitrilu. Byl sledován vliv struktury přidaného aminu na výsledné složení produktu, vliv přidaného aminu na rychlost úbytku jednotlivých reakčních složek a z výsledků jednotlivých experimentů byla diskutována síla sorpce reaktantů na použitý katalyzátor.

Tato práce vznikla za finanční podpory projektu FRVŠ G1 2515/2005 a projektu CEZ: MSM 6046137301

3P04

EFEKTIVNÍ SYNTÉZY OPTICKY ČISTÝCH DERIVÁTŮ KYSELINY 1,2,3,4-TETRAHYDROISOCHINOLIN-3-KARBOXYLOVÉ

Jansa Petr, Macháček Vladimír

Katedra organické chemie,
Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice,
nám. Čs. legii 565,CZ-532 10 Pardubice,
e-mail: jansap@email.cz

Byla studována příprava derivátů kyseliny 1,2,3,4-tetrahydroisochinolin-3-karboxylové (Tic). Byly připraveny hydrochloridy methylesterů a *N*-karboxyanhydridy. Pro přípravu *N*-karboxyanhydridů byla použita fosgenace roztokem fosgenu v dichlormethanu. Byl identifikován meziprodukt při fosgenaci Tic kyseliny - *N*-chlorkarbonylderivát Tic kyseliny. Analogický *N*-chlorkarbonylderivát byl připraven i z methylesteru Tic kyseliny. Zdvojení signálů v NMR spektrech *N*-chlorkarbonylderivátů bylo vysvětleno brzděnou rotací okolo vazby N-COCl. Stejný jev byl pozorován i v NMR spektrech *N*-acetylderivátu methylesteru Tic kyseliny. Z *N*-karboxyanhydridu Tic kyseliny byl reakcí s methylesterem Tic kyseliny připraven odpovídající 2,5-dioxopiperazin. Tento 2,5-dioxopiperazin se podařilo připravit z *N*-karboxyanhydridu také reakcí v tuhé fázi při 100°C v inertní atmosféře. Reakcí methylesteru Tic kyseliny s isokyanáty byly připraveny substituované estery hydantoinové kyseliny a z nich odpovídající *N*-substituované hydantoiny. U hydantoinů s objemnými nesymetrickými substituenty byla pozorována existence atropoisomerů. Analogickou reakcí isothiokyanátů byla připravena série osmi *N*-substituovaných thiohydantoinů Tic kyseliny. Reakcí methylesteru Tic kyseliny s 2,6-bis(chlorkarbonyl)pyridinem byla připravena látka mající charakter potenciálního chirálního ligandu pro enantioselektivní katalýzu. Pomocí NMR spektroskopie a výpočetních metod byla studována její struktura. Byly připraveny koordinační sloučeniny tohoto ligandu s kationty Co^{2+}, Co^{3+}, Cu^{2+} a Fe^{3+}. Struktura koordinační sloučenina s kationtem Co^{3+} byla studována pomocí NMR spektroskopie.

Třicet šest připravených látek bylo odesláno na testování jejich biologické aktivity.

3P05

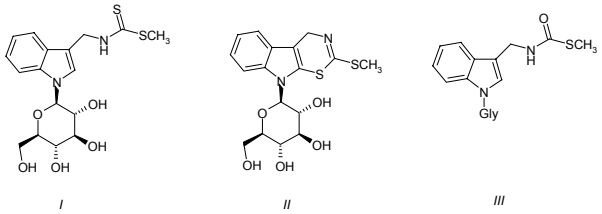
SYNTÉZA ANALÓGOV NUKLEOZIDOV ODVODENÝCH OD INDOLOVÝCH FYTOALEXÍNOV

Mária Repovská, Peter Kutschy

Univerzita P. J. Šafárika, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied,
Katedra organickej chémie, Moyzesova 11, 041 67 Košice, Slovensko
e-mail: repovska@kosice.upjs.sk

Indolové nukleozidy sa stali obzvlášť zaujímavými po objasnení štruktúry niektorých vysokoúčinných prírodných antibiotík s protinádorovou účinnosťou ako sú rebekamycín [1] a staurosporín [2]. Antibiotikum rebekamycín je *N*-glykozid s indolkarbazolovým skeletom a cukrom na jednom z indolových dusíkov. Bol izolovaný z fermentačných výluhov baktérií *Saccharothrix aerocolonigenes*. V roku 1987 bola opísaná jeho protinádorová aktivita voči P388 a L210 bunkovým líniám leukémie a B16 melanómu. Jeho mechanizmus účinku spočíva v inhibícii topoizomerázy I. Antibiotikum staurosporín bolo izolované z baktérií *Streptomyces staurosporeus*. Záujem o jeho výskum vyplýva z jeho schopnosti inhibovať proteínkinázu C v nanomólovej koncentrácii, čo súvisí s možnosťou jeho využitia pri vývoji nových protinádorových liečiv.

V roku 2004 boli pri štúdiu detoxikačného procesu huby *Sclerotinia sclerotiorum* izolované dva nukleozidové analógy odvodené od indolových fytoalexínov a to 1-(β-D-glukopyranozyl)brasinín (*I*) a 1-(β-D-glukopyranozyl)cyklobrasinín (*II*) [3]. V príspevku bude venovaná pozornosť syntéze prírodných látok *I* a *II*, ako aj ďalších analógov nukleozidov odvodených od indolových fytoalexínov, ako sú napríklad *N*-glykozidy brasitínu *III* (Gly = β-D-glukopyranozyl, β-D-ribopyranozyl, β-D-ribofuranozyl).



Táto práca vznikla s podporou grantov VEGA, č. 1/9246/02 a 1/2472/05

[1] Prudhomme M.: *Eur. J. Med. Chem., 38,* 123, (2003)

[2] Gescher A.: *Gen. Pharmac., 31,* 721, (1998)
[3] Pedras M. S. C., Ahiahonu P. W. K., Hossain M.: *Phytochemistry, 65,* 2685, (2004)

3P06

SPECTRAL CHARACTERISTICS OF PROBES BASED ON BENZOTHIOXANTHONE AND HINDERED AMINE IN SOLUTION AND IN POLYMER MATRICES

Pavol Hrdlovič[1], Štefan Chmela[1], Martin Danko[1] Mohamed Sarakha[2], Ghislain Guyot[2]

[1]*Polymer Institute, Centre of Excellence of Degradation of Biopolymers, Slovak Academy of Sciences, 842 36 Bratislava, Dúbravská cesta 9, Slovakia, e-mail: upolhrdl@savba.sk*
[2]*Laboratoire de Photochimie Moleculaire et Macromoleculaire, UMR CNRS 6505, Université Blaise Pascal, F-63177 Aubiere-Cedex, France*

Absorption and emission spectroscopy as well as laser flash photolysis was used to characterize the spectral properties of chromophore - benzothioxanthene 3,4-dicarboxylic anhydride (BTXA) and probes based on this chromophore covalently bonded with sterically hindered amine as 2-(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidyl)-thioxantheno[2,1,9-dej]isoquinoline-1,3-dione (BTXNH) and as stable nitroxyl radical 2-(1-oxo-2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidyl)-thioxantheno[2,1,9-dej]isoquinoline-1,3-dione (BTXNO). Spectral properties were studied in solution and polymer matrices of polystyrene (PS) poly(methyl methacrylate) (PMMA) and poly(vinyl chloride) (PVC). The main goal of these studies is to evaluate the extent of intramolecular quenching on singlet as well as triplet level.

Intramolecular quenching on singlet level, monitored by fluorescence and expressed as the ratio quantum yields Φ_{NH}/Φ_{NO} or lifetimes τ_{NH} /τ_{NO} for parent and oxidized amine respectively, depends on the medium. The values of quantum yield ratio are higher than ratio of lifetimes. The intramolecular quenching on singlet level by linked N-oxyl structural unit for this probe with complex chromophore is less efficient than for probe containing the structurally related 1,8-naphthalenedicarboxylic anhydride.

Laser flash photolysis indicated that the decay of transient absorption of parent chromophore BTXA and probes as parent amine BTXNH and as aminooxide BTXNO is clearly exponential but for BTXA and BTXNO it is rather complex with distinct rapid and slow part. The rapid decay corresponds probably to the triplet sate. The intermolecular quenching of transient absorption by oxygen and free N-oxyl (TEMPO) was not efficient. The intramolecular quenching on triplet level expressed as ratio of the decay rate constant of oxidized form and parent amine k_{NO} /k_{NH} is about 2 in cyclohexane and higher about 4 in methanol if the fast part of the complex decay of BTXNO is considered and 2.5 for slow part. The intramolecular as well as intermolecular quenching by oxygen and TEMPO for this probe with more complex chromophore is less efficient as for probe of structurally related 1,8-naphthaleneimide.

Authors thank CNRS for support of laser flash photolysis through bilateral French-Slovak project and grant agency VEGA for financial support of the projects 2/3002/23 and 2/5108/25.

3P07

STUDIUM TEPLOTOU-INDUKOVANÉ FÁZOVÉ SEPARACE VE VODNÝCH ROZTOCÍCH POLYMERŮ NMR SPEKTROSKOPIÍ

Jiří Spěváček

Ústav makromolekulární chemie AV ČR, 162 06 Praha 6, ČR; spevacek@imc.cas.cz

Některé polymery, včetně polyvinylmetyléteru (PVME) a poly(N-isopropylmethakrylamidu) (PIPMAAm), vykazují ve vodných roztocích dolní kritickou rozpouštěcí teplotu (LCST), tj. jsou rozpustné při nižších teplotách, ale zahřátí nad LCST vede k fázové separaci a k tvorbě globulárních struktur. V přednášce budou na příkladu několika námi nedávno studovaných systémů [1,2] demonstrovány některé možnosti ^{1}H NMR spektroskopie při studiu strukturně-dynamických změn a interakcí polymer-rozpouštědlo v průběhu teplotou-indukované fázové separace ve vodných polymerních roztocích

Teplotní závislosti hodnot fázově-separovaného podílu, jež lze získat z ^{1}H NMR spekter vysokého rozlišení, umožnily kvantitativně charakterizovat fázovou separaci v D_2O roztocích PVME, PIPMAAm a směsí PIPMAAm/PVME. NMR měření kombinovaná s gelovou permeační chromatografií ukázala, že v PVME/D_2O roztocích minoritní pohyblivá složka tvořená polymerními segmenty, které nejsou fázově separovány, náleží řetězcům PVME o nízké molekulové váze. Z měření spin-spinových relaxačních dob T_2 protonů PVME i molekul HDO u semizředěných či koncentrovaných roztoků byla navržena houbě-podobná struktura fázově separovaných globulí s póry, které mohou obsahovat molekuly vody. S časem je interakcemi polymerních segmentů vázaná voda z takovýchto globulárních struktur velmi pomalu vytlačována, póry mizí a globule se stávají kompaktnějšími.

Autor děkuje Grantové agentuře ČR (grant č. 525/05/0273) a AV ČR (grant AVOZ 40500505) za finanční podporu.

[1] J. Spěváček, L. Hanyková, L. Starovoytova, Macromolecules, 37, 7710-7718 (2004)
[2] L. Starovoytova, J. Spěváček, L. Hanyková, M. Ilavský, Polymer, 45, 5905-5911 (2004)

3P08

LIQUID CHROMATOGRAPHY OF SYNTHETIC POLYMERS UNDER LIMITING CONDITIONS OF ADSORPTION OR DESORPTION

Dušan Berek, Marián Šnauko

Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovakia
Dusan.Berek@savba.sk

A novel group of liquid chromatographic methods [1] for separation of complex synthetic is based on the "barrier principle". Macromolecules, which are partially or fully excluded from the packing pores travel along a HPLC column (much) faster than small molecules of auxilliary liquids, which permeate practically all pores of the column packing. A „barrier“ of appropriately chosen small molecules hinders fast progression of adsorbing polymer species. At the same time, the non-adsorbing macromolecules will break-through the barrier and separate.

Two different approaches are possible. Either eluent itself forms a barrier and macromolecules are injected in the adsorption preventing solvent (Liquid Chromatography under Limiting Conditions of Adsorption - LC LCA) or a zone of adsorption promoting liquid is injected just before polymer solution (Liquid Chromatography of Desorption, LC LCD).

Present tests show that both LC LCA and LC LCD methods

- are rather insensitive to eluent and temperature changes
- work in a broad area of polymer molar masses and produce narrow, focused polymer peaks
- allow easy separation of polymers differing in their interactivity, even if their molar masses are almost identical

Moreover, LC LCA is able to separate minor macromolecular admixtures (<1%) from polymer blends and LC LCD can be applied for separation of statistical copolymers.

This work was supported by the APVT grant No. 51-013 204.

[1] D.Berek, Progr.Polym.Sci. 25 (2000) 873 - 908

3P09

POUŽITÍ NAFIONOVÉ MEMBRÁNY V MEMBRÁNOVÉM VSTUPU HMOTNOSTNÍHO SPEKTROMETRU

Pavel Janderka, Petr Ostřížek, Matylda Gernátová

Katedra teoretické a fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta MU, Kotlářská 2, 611 37 Brno
janderka@chemi.muni.cz, p.ostrizek@email.cz, mgernatova13@yahoo.co.uk

Jedním ze problémů membránového vstupu (MIMS) je, že vstupní proud plynů není předběžně rozseparován např. pomocí plynového chromatografu. Roli separátoru sehrává sama teflonová membrána[1]. Membrána musí být hydrofobní a tím je výběr materiálů membrán poměrně omezený.

V naší práci jsou prezentovány první výsledky s použitím Nafionové membrány s cílem budoucího použití jako separátoru v rámci metody diferenciální elektrochemické hmotnostní spektrometrie (DEMS)[2].

Byly zvoleny tři testovací sady: (I) benzen-toluen-xylen, (II) metanol-etanol-propanol a (III) halogenbezeny. Uvedené látky byly již dříve používány jako modelové sloučeniny a jejich MS spektra jsou dostatečně přesně známá[3].

Bylo zjištěno, že látky membránou procházejí, avšak naměřené hmotnostní spektrum odpovídá „protonizované“ podobě molekul. MS spektra jsou méně fragmentovaná. Vzhledem k tomu, že není známo z literatury, že by podobný jev byl již popsán, není možné vyloučit, že k protonizaci dochází již v nafionové membráně.

Tato práce vznikla v rámci řešení výzkumného záměru MSM 0021622412

[1] Brož P., Drbálková E., Janderka P., Vřešťál J.: Chemické Listy 94, 123-128, 2000.
[2] Janderka P., Drbálková E., Vřešťál J.: Chemické Listy, 96, 103-110, 2002
[3] http://webbook.nist.gov.

3P10

POLYMERNÍ NOSIČE LÉČIV S HYDROXYBISFOSFONÁTOVÝMI SKUPINAMI PRO CÍLENÝ TRANSPORT DO KOSTNÍ TKÁNĚ

Martin Hrubý[1]*, Tomáš Etrych[1], Jan Kučka[2], Karel Ulbrich[1]

[1]Ústav makromolekulární chemie Akademie věd České republiky, Heyrovského nám. 6, 162 06 Praha 6, Česká Republika;
[2]Katedra organické a jaderné chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Hlavova 2030, 128 43 Praha 2, Česká Republika;
**adresa pro korespondenci: mhruby@centrum.cz*

Kostní tkáň se vyznačuje řadou specifik oproti jiným tkáním lidského organismu, které vyplývají z její primárně mechanické funkce. Hlavním specifikem je přítomnost velkého množství minerálu hydroxyapatitu (HA), který zlepšuje její mechanické vlastnosti.

Nástup (hydroxy)bisfosfonátů (HBF; např. alendronátu a zolendronátu), které inhibují činnost osteoklastů, znamenal zásadní průlom v terapii řady onemocnění spojených s patologickou degradací kosti, především Pagetovy choroby, osteoporózy a kostních metastáz. Mechanismem potlačení činnosti osteoklastů je především inhibice farnesyltransferázy, ale i přímá interakce s povrchem HA. HBF jsou po parenterální aplikaci rychle, z velkého procenta a prakticky ireverzibilně vychytávány v kostní tkáni chelatací na povrch HA v důsledku sterické podobnosti těchto léčiv s difosfátem normálně přítomným ve struktuře HA. Distribuce podle struktury kostí není homogenní, ale dochází k preferenčnímu

vychytávání v oblastech kosti s vysokou remodelační aktivitou, jako jsou např. osteolytické metastatické nádorové leze (až desetinásobně větší koncentrace než v normální kosti [1]), pravděpodobně díky větší přístupnosti povrchu HA v těchto místech.

Připravili a charakterizovali jsme nový polymerní nosičový systém umožňující cílený transport radiodiagnostik, radioterapeutik a protinádorových léčiv do kostní tkáně. Systém je založen na kopolymeru N-(2-hydroxypropyl)methakrylamidu obsahujícímu HBF cílící skupiny a model radioterapeutika (^{125}I), radiodiagnostikum (^{111}In) respektive protinádorové léčivo doxorubicin. In vitro studie vazby těchto nosičů na HA prokázaly velmi rychlou, na obsahu HBP závislou adsorbci na tento minerál. Modelová léčiva byla navázána následujícími chemickými spojkami: stabilní amidickou, pH labilní hydrazonovou a v endosomech kathepsinem B enzymaticky štěpitelnou tetrapeptidovou (Gly-Phe-Leu-Gly). Léčivo vázané štěpitelnými vazbami může být efektivně uvolněno na základě pH, respektive enzymatického stimulu, jak bylo prokázáno in vitro modelových studiích.

Autoři děkují Grantové agentuře Akademie věd České republiky (grant č. B4048302 a B4050408) a Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy (grant č. IM 4635608802) za finanční podporu.

[1] Stepensky D., Kleinberg L., Hoffmann A., *Clin. Pharmacokinet., 42*, 863-81, (2003).

3P11

SULFONOVANÉ DERIVÁTY DPP PIGMENTŮ A MOŽNOSTI JEJICH PRŮMYSLOVÉHO VYUŽITÍ

Libor Dušek, Radim Hrdina, Ladislav Burgert

Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Katedra technologie organických látek, Studentská 95, 532 10 Pardubice, Czech Republik, libor.dusek@upce.cz

Sloučeniny obsahující ve své struktuře planární symetrický chromofor na bázi 1,4-diketopyrrol-(3,4-c)-pyrrolového systému, obsahujícího 8p elektronů, jsou většinou nerozpustné oranžové až červené látky, využívané v praxi jako tkz. DPP pigmenty. Ty obecně bez přihlédnutí ke vlivu substituce vynikají excelentní světlostálostí, odolností vůči povětrnostním vlivů a velmi dobrou rezistencí vůči migraci. Zavedením nejméně dvou sulfoskupin do jejich molekuly vzroste jejich rozpustnost ve vodných roztocích do té míry, že nově připravené sloučeniny lze využít jako barviva pro barvení vlny a polyamidu. Takto byly dvěma způsoby sulfonace modifikovány komerčně vyráběné DPP pigmenty P.R. 255 a P.R. 264. Připravená barviva vykazovala při barvení vlny a polyamidu vyčerpání z lázně přes 95%. Dále byl testován potting a světlostálost a stálobarevnost. Nesymetricky sulfonované DPP sloučeniny, obsahující pouze jednu sulfoskupinu, již nelze využít jako textilní barviva a současně pozbývají vlastností pigmentu. Díky jejich parciální rozpustnosti se nabízí jejich využití při průmyslové syntéze DDP pigmentů jako moderátorů růstu pigmentových částic přímo v reakční směsi. Jako takové tak přímo ovlivňují tvar, velikost povrchu, distribuční zastoupení a stupeň agregace a aglomerace pigmentových částic. To se nepřímo odráží v užitných vlastnostech finálního produktu prostřednictvím jeho koloristické síly, jasu, transparence a v neposlední řadě i v barevném odstínu.

[1] EPA 224 445, (1987).
[2] J. Vyňuchal, S. Luňák, R. Hrdina: *10th International Konference on Dyes, Pigments and Functional Dyes* 23-27 May, 2004, P23.
[3] EPA 302 018, (1989).

3P12

POLYSACCHARIDES AND DEVELOPMENT OF CHEMICAL INDUSTRY IN APPROACHING HALF-CENTURY

Piotr Tomasik

Department of Chemistry, Agricultural University, Mickiewicz Ave., 21, 31 120 Cracow, Poland; e-mail: rrtomasi@cyf-kr.edu.pl

The European Community outlook for the development of chemical industry up to 2040 assumes a 300% increase in its annual output. That increase would be possible without intensification of the production of fossils and nuclear energy. There is a focus on versatile, renewable, biodegradable resources. Except polar regions and deserts, they are available elsewhere as polysaccharides, that is, cellulose from wood, starch from crops of tubers and wheat, and some fruits and vegetables (chestnuts, beans and so on), hemicelluloses of straw and other plants. Except cellulose, such sources are renewable in an annual cycle.

There are several ways of processing of such sources and further technologies are under development. Beyond the nutritional purposes, a microbial fermentation to ethanol is, perhaps, the most common way of utilization of polysaccharide crops. Further common approach in this respect is the energy production through combustion and, recently more common, conversion of biomass into biogas. A progress in this field accepts production of so-called new biomass.

Pyrrolysis of polysaccharides into volatile gaseous products and charcoal is another way of their utilisation. On such way gaseous products could be utilised as fuels, and another portion of fuels could be available from hydrogenation of charcoal.

Depolymerisation of polysaccharides to methanal opens a path to methanol, one of the fundamental chemicals of the chemical industry. Finally, there is several methods of physical, physicochemical, chemical and biotechnological modifications of polysaccharides, Among them starch and cellulose enjoy a priority.

3P13

RECOVERABLE ORGANOSELENIUM CATALYSTS

J. Młochowski, M. Brząszcz, M. Giurg, H. Wójtowicz

Departament of Organic Chemistry, Faculty of Chemistry, Wrocław University of Technology, Wyb. Wyspiańskiego 27, 50 370 Wrocław, Poland, jacek.mlochowski@pwr.wroc.pl

In our previous works we reported several organoselenium compound being homogenous oxygen-transfer catalyst for hydroperoxide oxidation of various groups of organic compounds . [1] In this work we designed several heterogenous, easy to recover, catalysts having selenenamide or diselenide moiety covalently bounded to a silica or polymer supports and elaborated their synthesis. They were successfully employed in the different reactions, such as oxidation of alkylarenes to acylarenes, aromatic aldehydes, aldoximes or tosylhydrazones, to arenecarboxylic acids, oxidative conversion of benzylamines to nitriles and ethers to carboxylic esters. The sulfides were oxidized to sulfoxides and/or sulfones depending on the substrate, catalyst and reaction conditions. The stoichiometric oxidants were 30% hydrogen peroxide and 80% tert-butyl hydroperoxide while the catalysts were used in amount up to 5 molar % (calculated on selenium) in relation to the substrate. They retained activity of their homogenous analogues, could be recovered from the reaction mixture by filtration and reused in next several runs. The mechanisms of their action are also discussed.

This work was supported by the Polish State Comm.for Scientific Research (grant No T09A 003 27).

[1] J. Młochowski, M. Brząszcz, M. Giurg, J. Palus, H. Wojtowicz, *Eur. J. Chem.*, **2003**, 4329.

3P14

NĚKTERÁ ÚSKALÍ SOUČASNÉHO VÝZKUMU A VÝVOJE LÉČIV

Miroslav Kuchař

VÚFB Zentiva, a.s., U kabelovny 130, 102 01 Praha 10, Česká republika

V přednášce je diskutován výzkum a vývoj originálních i generických léčiv, při čemž je věnována pozornost významným rozdílům v metodologii i výsledcích v obou skupinách léčiv, zvláště pak ve vztahu těchto léčiv k patentové ochraně aktivních farmaceutických substancí.

Rozdělení léčiv podle vztahu výrobce k patentové ochraně

1. pod patentovou ochranou látkovou
   a) originální léčiva (original brands)
   b) licensovaná léčiva (licensed brands)
2. mimo patentovou ochranu
   c) neznačková generika (unbranded products)
   d) známkové ekvivalenty (branded products)

Ve výzkumu originálních léčiv jsou hodnoceny rizikové faktory specifické pro tento výzkum a možnosti jejich minimalizace. Volba vhodného programu a projektu ve vztahu k jeho inovačnímu potenciálu představuje jeden z důležitých předpokladů úspěšného výzkumu. Z tohoto hlediska budou diskutovány vývojové trendy v nových léčivech obecně i v jednotlivých terapeutických kategoriích. Rovněž nové metodické přístupy, které racionalizují výzkum originálních léčiv představují významný nástroj snižující rizika výzkumu originálních léčiv. Zvláštní pozornost zasluhuje rovněž rychle se rozvíjející vývoj biotechnologických léčiv úzce spojený s rozvojem genomiky a genového inženýrství.

V oblasti vývoje generických léčiv (známkových ekvivalentů) budou diskutovány faktory ovlivňující trh generických léčiv, jeho současný trend a budou analyzovány silné a slabé stránky vývoje trhu generik. Budou formulovány hlavní předpoklady pro vývoj úspěšného generika a charakterizovány klíčové trhy generických léčiv.

3P15

SYNTHESIS OF BIS-CYSTINYL FRAGMENTS OF HUMAN IgG1 HINGE REGION IN SOLUTION AND ON THE SOLID AND SOLUBLE POLYMERS

Jan Hlaváček, Petr Niederhafner, Vladimír Gut, Hana Hulačová, Petr Maloň

Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, Flemingovo nám. 2, 166 10 Prague 6, Czech Republic, e-mail: honza@uochb.cas.cz

The problem with reproduction of effect in the field of synthetic vaccines could be alleviated using the chemically defined carrier of relatively rigid structure. One of such molecules - a parallel hexadecapeptide (H-Thr-Cys-Pro-Pro-Cys-Pro-Ala-Pro-OH)$_2$ - was found in the central part of protein from the surface region of human IgG1. We developed syntheses of this peptide and its shortened analogs using a solution or soluble (PEG)/insoluble (PS-DVB) polymer supports. In the solution and PEG syntheses, the disulfide bonds were introduced directly to above peptide using S-Trt derivatives of bis-N$^{\alpha}$-Boc-cystine. Thus, the parallel arrangement of both the linear sequences was achieved unequivocally. Using PEG, the lysine was loaded first to grow the peptide sequence on both the amino groups of this amino acid, followed by introduction of protected cystine. Alternatively to convention mild saponification, the thermolysin was used for detachment of peptide from the PEG after the C-terminal proline was replaced for leucine. When using PS-DVB support, the Fmoc/tBu,Trt protection was utilized. The disulfide bridges closure by the action of pure oxygen under atmospheric pressure shortened the oxidation time four times in comparison with air oxidation.

Supported by grant No. 203/03/1362 from the Grant Agency of the Czech Republic and by research project Z4 055 0506 of the Czech Academy of Sciences.

3P16

POVRCHOVÉ VLASTNOSTI NANOKOMPOSITNÍCH NÁTĚRŮ

Milena Špírková[1]*, Miroslav Šlouf[1], Olga Bláhová[2], Tereza Farkačová[2]

[1] Ústav makromolekulární chemie AV ČR Praha, Heyrovského nám. 2, 16206 Praha 6
** E-mail: spirkova@imc.cas.cz*
[2] Západočeská universita v Plzni, Fakulta strojní, katedra materiálu,Universitní 20, 30614 Plzeň

Byly studovány povrchové vlastnosti (především morfologie a tvrdost) hybridních organicko-anorganických nátěrových filmů. Tyto charakteristiky patří ke stěžejním materiálovým vlastnostem těchto produktů, neboť výrazným způsobem předurčují jejich praktickou využitelnost. Povrchová tvrdost je však velmi nejasně definována s dostatečnou přesností; tudíž je nutné vždy vymezit podmínky analýzy. Elasticita nátěrových hmot je výrazem tendence materiálu vrátit se po ukončení deformace způsobené vnějšími silami do původního stavu a znovuzískání původního povrchu. Konečným cílem proto není získávat produkty s extrémní povrchovou tvrdostí nebo naopak extrémní elasticitou, ale vhodnou kombinaci obou těchto často protichůdných proměnných.

Pro povrchovou ***morfologii*** byly využity mikroskopické metody (mikroskopie atomových sil, světelná a rastrovací elektronová mikroskopie), povrchová ***tvrdost*** byla stanovena jako odolnost proti poškrábání, nanoindentačními testy a kyvadlem (typu Persoz). Všemi těmito metodami bylo zjištěno, že nejlepší povrchovou tvrdost vykazují nátěry, které se při teplotě analýzy, 23 ^{o}C, vyskytují v hlavní přechodové oblasti. Porovnají-li se vzájemně nátěry, jež jsou při 23 ^{o}C ve sklovitém nebo kaučukovitém stavu, vyšší odolnost proti poškrábání prokazuje vzorek v kaučukovitém stavu, zatímco u ostatních dvou metod (nanoindentace, kyvadlová zkouška) je toto pořadí obrácené. Vliv plniv různé velikosti a tvaru (koloidní silika, montmorillonit) na morfologii, frikční koeficienty a koeficienty proti opotřebení (stanovené tribologickými zkouškami) bude rovněž diskutován.

Autoři děkují Grantové agentuře Akademie věd České republiky (A400500505) za finanční podporu.

3P17

POVRCHOVÁ MODIFIKÁCIA POLYOLEFÍNOV OČKOVANÍM ORGANOFUNKČNÝMI SILÁNMI

Igor Krupa, Tomáš Nedelčev, Angela Kleinová, Igor Novák

Ústav polymérov, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovensko, E-mail: upolkrup@savba.sk

Hybridné materiály na báze najrozmanitejších typov organofunkčných silánov nachádzajú v súčasnosti veľké využitie v rôznych oblastiach materiálového výskumu ako aj priemyselných aplikácií. Okrem povrchových modifikácií kovov a keramiky, v čoraz väčšej miere sa organofunkčnými silánmi modifikujú aj povrchy polymérnych materiálov. V textilnom priemysle je napríklad v súčasnosti trend povrchovej modifikácie vlákien a tkanín s cieľom zlepšiť ich pevnosť, oderuvzdornosť, modifikovať hydrofóbne či oleofóbne vlastnosti, vyfarbiteľnosť a podobne.

Jedným z kľučových problémov pri povrchovej modifikácii polymérov v tuhej fáze je obtiažnosť pevného, pokiaľ možno kovalentného naviazania silánov na povrch polymérnych materiálov, čo vyplýva z nízkej reaktivity polymérov v tuhom stave. Tento problém je výrazný najmä u nepolárnych polyolefínov.Cieľom tohoto príspeku je diskutovať možnosti naviazania vinylalkoxysilánov na povrch polyolefínov využitím rádiofrekvenčnej plazmy pri zníženom tlaku, v prostredí argónu. Vinylsilán sa najskôr nanášal na povrch fólií LDPE, HDPE a iPP zo zriedených roztokov. Po vyschnutí sa aplikovala rádiofrekvenčná plazma, v dôsledku čoho nastalo kovalentné naviazanie vinylovej skupiny na povrch polymérov. V ďalšom kroku sa odstránil nezreagovaný zvyšok silánu a fólie sa ponechali nejaký čas v 1M roztoku NaOH, aby sa zabezpečila maximálna hydrolýza a kondenzácia alkoxy skupín. ATR spektroskopia potvrdila naviazanie vinylsilánu na povrch LDPE, HDPE aj iPP. Meranie uhlov zmáčania indikovalo výrazný nárast polarity povrchov polymérov.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu vedy a techniky prostredníctvom finančnej podpory č. APVT-99-035004.

3P18

POLYIMIDY NA BÁZI 1,3-XYLYLENDIAMINU

Petr Sysel, Tereza Koptíková, Hana Kompertová, Radana Čechová, Marie Fryčová

Ústav polymerů, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika, Petr.Sysel@vscht.cz

Aromatické polyimidy pro svou celkovou odolnost v rozmezí teplot přibližně -100 až 250 °C patří mezi polymery s vysokými užitnými vlastnostmi. Tyto rigidní polymery s vysokou teplotou skelného přechodu nacházejí uplatnění především v (mikro)elektronice, leteckém průmyslu a v poslední době i jako separační membrány [1]. Neporézní, ploché polyimidové membrány vykazují dobrou dělící schopnost pro řadu směsí plynů, ale nízkou propustnost jak pro plyny tak pro páry organických látek. Nadějná cesta k polymerním membránám s vyšší propustností spočívá v jejich kombinaci s (mikro)porézními plnivy (zeolity, polymerními adsorbenty, apod.) Transportní vlastnosti kompozitních membrán, jejichž matrice je tvořena rigidním polymerem, jsou však často ovlivněny nekvalitním fázovým rozhraním polymer - plnivo [2]. V předcházejících pracech, např.[3], byla mezifázová adheze zlepšena vytvořením chemické vazby mezi polymerní matricí a plnivem prostřednictvím

spojovacího činidla zavedeného na konce polymerních řetězců. Další cestou ke zlepšení vzájemné adheze by mohlo být použití polyimidové matrice se sníženým zastoupením aromatického podílu (s vlivem např. na rigiditu řetězců a jejich interakce). Za tímto účelem byl v této práci jako monomer testován komerčně dostupný 1,3-xylylendiamin v kombinaci s tradičními aromatickými diaminy a dianhydridy. Bude prezentováno studium přípravy polyimidů na bázi tohoto monomeru a vlastností produktů v závislosti na jejich složení.

Tato práce vznikla jako součást projektu GA ČR 104/03/0680 a výzkumného záměru MSM 6046137302.

[1] Sroog C. E.: *Prog. Polym. Sci. 16*, 561 (1991)
[2] Zimmerman C. M., Singh A., Koros W. J.: J. *Membr. Sci. 137*, 145 (1997)
[3] Sysel P., Fryčová M., Hobzová R., Krystl V., Hrabánek P., Bernauer B., Brabec L., Kočiřík M.: *Stud. Surf. Sci. Catal.* 142, 1521 (2002)

3P19

COLD-CRYSTALLIZATION OF SYNDIOTACTIC POLYSTYRENE

Roman Čabla, Martin Obadal, and Karel Stoklasa

Department of Polymer Engineering, Faculty of Technology, Tomas Bata University in Zlín, Nám. T.G. Masaryka 275, 762 72 Zlín, cabla@ft.utb.cz

Polystyrene is usually used in the atactic form without crystallinity. However, there is an increasing interest in the syndiotactic form (sPS) [1]. The high stereoregularity allows sPS to obtain a high level crystallinity, resulting in a high melting temperature, a low specific gravity, excellent electrical properties, hydrolytic resistance and high solvent resistance [2].

Syndiotactic polystyrene is known by its polymorphism, which is very complex. According to crystallization conditions (thermal history and/or solution treatments) sPS can crystallize into four different unit cell forms (α, β, γ, δ). The α and β forms are the most common and both are obtained by crystallization from the melt [3]. The aim of this work is to analyze the cold-crystallization of sPS melt-processed using injection molding. For these purposes, commercially available sPS Questra QA 101 produced by Dow Chemical Company was used. Isothermal cold-crystallization and consequent melting behavior were analyzed using differential scanning calorimetry. Polymorphic composition was evaluated by means of wide-angle X-ray scattering.

From X-ray data it was found that during cold-crystallization in the skin layer α-phase was mainly formed. The core consisted of predominant β-phase. The crystallinity in the skin was lower as compared to the core layer. The crystallinity in the core did not significantly depended on the process of cold-crystallization. The glass transition temperature determined by differential scanning calorimetry was approximately 99 ^{o}C and melting point was approximately 273 ^{o}C.

This work was supported by research project G1, 1728/2005 from FRVŠ of the Czech Republic.

[1] Lawrence St S., Shinozaki D.M.: *Journal of materials science, 33*, (1998)
[2] Scheirs J., Priddy D.: *Modern styrenic polymers, Wiley, 299*, (2003)
[3] Sun Y.S., Woo E.M.: *Polymer, 42*, (2001)

3P20

VPLYV DEACIDIFIKÁCIE LIGNÍN-OBSAHUJÚCEHO PAPIERA NA JEHO STABILITU PRI MECHANICKEJ A TERMO-OXIDAČNEJ DEGRADÁCII - VYUŽITIE CHEMILUMINISCENČNEJ METÓDY PRI HODNOTENÍ NIEKTORÝCH VLASTNOSTÍ

Jozef Rychlý[a], Lyda Matisová-Rychlá[a], Vladimír Bukovský[b], Martina Pleteníková[b], Svetozár Katuščák[c]

[a]Ústav polymérov SAV, CEDEBIPO, 842 36 Bratislava, E-mai: upoljory@savba.sk
[b]Slovenská národná knižnica, Hronského námestie 1, 03601 Martin
[c]Katedra chemickej technológie dreva, papiera a celulózy, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava

Rozšírený názor medzi výskumnými pracovníkmi archívov a knižníc, snahou ktorých je predĺžiť životnosť nosičov informácií na báze papiera, je, že závery a aproximácie, ktoré sa akceptujú u čistej celulózy, napr. reprezentovanej papierom Whatman, strácajú platnosť pri skúmaní papiera obsahujúceho lignín. Vymedzenie reaktivity lignínu vo vzťahu k celulóze a za súčasnej prítomnosti iónových zlúčenín pri oxidácii papiera pritom predstavuje široký priestor pre výskum, a to ako pri teplom ako aj svetlom iniciovanej oxidácii. Z chemického hľadiska ide o ko-oxidáciu polymérneho kompozitu celulóza-lignín s intervenciou iónových zlúčenín v rozličných fázach reakcie. Lignín v porovnaní s celulózou je pomerne rezistentný proti kyslej hydrolýze, na druhej strane pri vyšších pH vznikajú v jeho štruktúre pomerne ľahko voľné radikály, ktoré môžu vplývať aj na stabilitu celulózy. Otázkou ostáva ako? Stabilizujú celulózu, podobne ako bolo ukázané u niektorých polyolefínov, alebo pôsobia prodegradačne? Za pozornosť stojí aj zvýšená citlivosť lignínu k fotoreakciám, ktorá bola síce predmetom mnohých štúdií, ale vzhľadom k roz-ličnému pôvodu a spôsobu izolácie lignínu bolo zatiaľ ťažké dosiahnúť jednotiaci pohľad na mechanizmus jeho pôsobenia. V súvislosti s rozsiahlym používaním deacidifikačných postupov, ako prvého kroku záchrany historických papierov s pH<7, má detailnejšie objasnenie vplyvu deacidifikačných procedúr na vzájomnú reaktivitu lignínu a celulózy značný význam.

Zvyškovú kvalitu papiera je možné kvantitatívne kontrolovať rozličným spôsobom dovtedy, kým nedôjde k úplnej strate mechanickej pevnosti a papier sa rozpadne na jednotlivé fragmenty. Väčšina techník je založená na

hodnotení vlastností základnej komponenty papiera - celulózy.

V predkladanej práci sa zameriavame na využitie možnosti korelácií rýchlostných konštánt termo-oxidačnej degradácie lignín obsahujúceho papiera stárnutého pri rozličných podmienkach s výsledkami mechanických testov. Základný poznatok, ktorý pritom využívame je nájdený súhlas medzi rýchlostnými konštantami poklesu polymerizačného stupňa určenými viskozimetricky a rýchlostnými konštantami oxidácie určenými z neizotermických chemiluminiscenčných meraní.

Autori ďakujú za finančnú podporu z projektu KNIHA-Sk MŠ SR a z projektu VEGA 2/3053/23.

3P21

TANDEMOVÉ RECYKLIZAČNÍ REAKCE ISOTHIOURONIOVÝCH SOLÍ ODVOZENÝCH OD PYRROLIDIN-2-ONU A PIPERIDIN-2-ONU

Jiří Hanusek, Miloš Sedlák, Ludmila Hejtmánková

Katedra organické chemie, FCHT Univerzita Pardubice, Nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice, e-mail: Jiri.Hanusek@upce.cz

Speciálním typem syntetické obměny heterocyklů jsou jejich přesmyky. Přesmyky heterocyklických kruhů probíhající dočasným otevřením a následným uzavřením za vzniku jiné molekuly jsou v současnosti předmětem zájmu jak z teoretického, tak i praktického hlediska. Takovými reakcemi, které nazýváme transformacemi kruhu nebo též recyklizačními reakcemi, často vznikají sloučeniny jinými cestami jen obtížně připravitelné.

V přehledném článku [1] jsou transformační reakce rozděleny do několika skupin podle povahy vznikajícího produktu. Do první skupiny patří tzv. *klasické transformace kruhu*, při kterých se nemění velikost heterocyklu ani počet a druh heteroatomů ale pouze jejich rozmístění.

Do další skupiny řadíme tzv. *degenerované transformace kruhu*. Těmito reakcemi vzniká produkt se stejným počtem i rozmístěním heteroatomů jako ve výchozí látce ale s rozdílnou substitucí.

Třetí skupina transformací zahrnuje reakce, při nichž se heterocyklický kruh buďto zvětšuje (expanze kruhu), nebo zmenšuje (kontrakce kruhu).

Pokud v průběhu reakce všechny heteroatomy, jež jsou součástí kruhu přecházejí do postranního řetězce a naopak z heteroatomů v původním substituentu se tvoří zcela nový heterocyklický kruh - mluvíme o *transformaci kruh-řetězec*, nebo též o *tandemové recyklizační reakci*.

V předchozích studiích prováděných na našem pracovišti bylo zjištěno [2,3], že S-[1-(4-subst.fenyl)pyrrolidin-2-on-3-yl]isothiouroniové soli a S-[1-(4-subst.fenyl)piperidin-2-on-3-yl]isothiouroniové soli podléhají tandemové recyklizační reakci, při níž zaniká γ-laktamový cyklus a vzniká thiazolidinový cyklus.

[1] Hajos G., Riedl Z., Kollenz G.: Eur. J. Org. Chem. 3404-3414 (2001).
[2] Sedlák M., Hanusek J., Hejtmánková L., Kašparová P.: *Org. Biomol. Chem. 1*, 1204 - 1209 (2003).
[3] Hanusek J., Hejtmánková L., Štěrba V., Sedlák M.: *Org. Biomol. Chem. 2*, 1756-1763 (2004).

3P22

NEW METHOD OF PREPARATION OF 1-ARYL-4-AMINO-5-ARYLDIAZENYLPYRIDAZINIUM SALTS

[1]Petr Šimůnek, [1]Markéta Pešková, [2]Valerio Bertolasi, [1]Vladimír Macháček, [3]Antonín Lyčka

[1]University of Pardubice, Department of Organic Chemistry, Pardubice, Czech Republic p.simunek@email.cz
[2]Universita di Ferrara, Dipartimento di Chimica and Centro di Strutturistica Diffrattometrica, Ferrara, Italy
[3]Research Institute for Organic Syntheses (VUOS), Pardubice-Rybitví, Czech Republic

1-Aryl-4-amino-5-aryldiazenylpyridazinium tetrafluoroborates[1] and hexafluorophosphates[2] were prepared from respective β-enaminones and substituted benzenediazonium tetrafluoroborates resp. hexafluorophosphates by simple new method.

The structure of the prepared compounds was certified by means of multinuclear magnetic resonance, especially ^{15}N and by X-ray diffraction.

This work was supported by Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (Project MSM0021627501).

[1] Šimůnek P., Pešková M., Bertolasi V. Macháček V., Lyčka A: Eur. J. Org. Chem. 5055-5063, (2004).
[2] Šimůnek P., Pešková M., Bertolasi V. Macháček V., Lyčka A: Tetrahedron submitted (2005).

3P23

THERMODYNAMIC COMPATIBILITY OF POLY(n-HEXYL METHACRYLATE) - POLYMETHYLENE SYSTEM

S. M. Aqeel, D. Lath*

Dept. of Chemistry, Faculty of Applied Science, Thamar University, P. O. Box 87039, Thamar , Yemen, salemaqeel@hotmail.com
** Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, 842 36 Bratislava, Slovakia*

Dilute solutions of poly(n-hexyl methacrylate) in homologous series of n-alkanes have been studied. The measurements of viscosity-temperature dependence of poly(n-hexyl methacrylate) in n-alkanes were applied to study hydrodynamic and thermodynamic properties of

poly(n-hyxyl methacrylate) in n-alkanes. Exchange parameters of poly(n-hexyl methacrylate) in n-alkanes have been determined according to Flory's theory and were applied to predict the mixing of polymethylene with poly(n-hexyl-methacrylate). The positive energy of mixing signifies mutual incompatibility of these polymers.

3P24

KOVALENTNÍ HYDRATACE NĚKTERÝCH KARBONYLOVÝCH A AZOMETHÍNOVÝCH SKUPIN

Petr Zuman

Department of Chemistry, Clarkson University, Potsdam, NY 13699-5810, USA email: zumanp@clarkson.edu

Je dobře známo, že karbonylové skupiny v alifatických sloučeninách a v postranních retězcích některých heterocyklů snadno podléhají kovalentní adici vody. Naproti tomu většina benzaldehydů zůstává ve vodních roztocích prakticky nehydratovaná. Výjimku tvoří o- a p-nitrobenzaldehydy, které jsou v roztocích hydratovány do 10 %.

Elektrochemickými a spektrofotometrickými metodami bylo prokázano, že dík silné resonanční interakci mezi dvěmi formylovými skupinami - jedna skupina CHO je ve vodných roztocích tereftalaldehydu přítomna v 20 % hydratované formy. Použití elektrochemických metod umožnilo studium hydratace vazby C=N u některých pyrimidinů, 1,2,4- a 1,2,3-triazinů. U sloučenin se skupinou >C(=N-OH).CF_3 dochází ke kovalentní hydrataci oximů.

4P01

HISTÓRIA VÝSKUMU PRÍRODNÝCH MINERÁLNYCH A LIEČIVÝCH VÔD NA SLOVENSKU

Jozef Čársky, Janka Zálešáková

Ústav lekárskej chémie, biochémie a klinickej biochémie LFUK Bratislava, jozef.carsky@fmed.uniba.sk, Slovenské liečebné kúpele a.s., Trenčianske Teplice, zalesakova@tn.psg.sk

Slovensko je krajina veľmi bohatá na minerálne a liečivé pramene (v súčasnosti je registrovaných viac ako 1200 zdrojov). Prvý systematický popis minerálnych vôd a kúpeľov na jeho území bol prezentovaný a dokumentovaný monografiou Juraja Wernhera, ktorá vyšla v prvom vydaní v Bazileji, roku 1549 pod názvom „De admirandis Hungariae aquis hypomnemation“. Táto práca sa stala základom pre uplatňovanie vedeckého prístupu pri poznávaní liečivých účinkov minerálnych vôd a v rozvoji kúpeľníctva všeobecne. Obsahuje nielen výpočet a charakteristiku v tej dobe známych minerálnych prameňov na území Uhorska, ale podáva aj vysvetlenie o ich vzniku pod povrchom Zeme, o pôvode ich teploty a spôsobe vylúhovania minerálnych solí. J. Wernher ako prvý urobil aj rozbor ich fyzikálnych a chemických vlastností a indikačné návody na použitie.

Záujem o minerálne vody a kúpele na Slovensku prejavovali najmä lekári, ktorí študovali na Lekárskej fakulte v Halle (kde pôsobil profesor F. Hoffmann, významná autorita balneologického výskumu v Európe), ktorí prenášali získané nové poznatky do kúpeľov na Slovensku. Patrili k nim najmä A. Hermann, J. Torkos a J. Lischovíny.

Rozvoju kúpeľníctva na Slovensku v 18. storočí napomohlo nariadenie panovníčky Márie Terézie z roku 1767 o vykonaní súpisu a analýzy všetkých liečivých vôd na území Uhorska. To znamenalo veľký impulz aj pre výskum v tejto oblasti. Mimoriadnym prínosom bolo vypracovanie nových metód chemickej analýzy o ktoré sa zaslúžil najmä J. Winterl, profesor chémie a botaniky na Lekárskej fakulte Trnavskej Univerzity.

4P02

WOMEN IN SCIENCE

Milan Melník

Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak Technical University, 812 37 Bratislava, Slovak Republic

Throughout history women have been interested in science and have made significant contributions to its advancement. Unfortunately their work has often been overlooked or forgotten. In addition, they have received few of the awards and appointments which their achievements merit. Only in the twentieth century has there been a concerted effort to redress these problems but much more remains to be done.

In spite of these difficulties women have continued to make significant it often unrecognized contributions. The list below and to the immediate right describe some exceptional women from earlier centuries and those further to the right identity a small number of those remarkable women who have made exceptional contributions to the explosive growth of chemistry in the 20th century.

There are several scientific areas with the significant women contributions:

Art: J. Morgan, M.L.M. Huggins

Astronomy: E. Hedei Anna, N.R. Lepaute, C.L. Herschel, M. Mitchel, E.M. Burbridge, A.M. Cannon, H. Sawyer Hagg

Biology: B. Potter, M. Bouting-Smith, L.E. Hawker, S.H. Schrader, J. Goodall, D. Fossey, F. Wong-Staal, R. Smith Eigenmann, R. Carson

Engineers: K. Gleason, H.M. Aryton

Genetic: M. Chase, B.McClintok, N.M. Stevens, I. Manton

Geology: W. Goldreng, I. Lehmann, M. McNutt, M.G. Kivelson

Chemistry: Si Ling-Chi, J. Villepreux-Power, M. Dell Chilton, R. Franklin, Ch. Nusslein-Volhard, M.F. Singer, G.B. Elion, D.M. Crowfoot Hodkin, C. Payne-Gaposchin, A. Pockels, M. Skolodowska-Curie, I. Joliot-Curie, M. Blau, K.Y. Landdale, P. Sherman, M. Spiewak Dresselhaus, H. Brooks, M. Mentel

Mathematics: Hypatia, M.G. Agnesi, S. Germain, A.A. Byron Lovelace, H. Leawitt, J. Robinson, D. Taussky-Todd, A. Noether, R. Peter, B. Liskov, N. Leveson

Medicine: R. Levi-Montalcini, R. Yallow, J. Plummer Cobb, M. Abbot

Physics: L. Meitner, M.D. Waller, Chien-Shiung Wu, H.T. Edwards, L. Dolan, M.K. Gailard, R. Kallosh, J. Bell Burnell, L. Meitnerova

Because of lack of space, more details will be the subject in my lecture.

4P03

INTEGRAČNÍ TENDENCE VE VÝUCE PŘÍRODOVĚDNÝCH PŘEDMĚTŮ: PŘÍLEŽITOST NEBO HROZBA PRO VÝUKU CHEMIE?

Martin Bílek, Pavel Opatrný, Olga Řádková

Katedra chemie, Pedagogická fakulta, Univerzita Hradec Králové, Rokitanského 62, 500 03 Hradec Králové, Martin.Bilek@uhk.cz

Nové pojetí kurikula všeobecného přírodovědného vzdělávání (Rámcové vzdělávací programy pro základní školu a gymnázium - vzdělávací oblast Člověk a příroda) přináší možnosti nejen inovace obsahu a metod výuky, ale i zásadních strukturálních změn v učebních plánech, tj. v tradičním zastoupení a hodinové dotaci předmětů. Znovu začínají být diskutovány otázky výhod a nevýhod integrovaných přírodovědných předmětů nebo samostatných předmětů, kterými jsou v této vzdělávací oblasti fyzika, chemie, biologie a geografie. V současné době je pracoviště autorů příspěvku spoluřešitelem výzkumného projektu GAČR 406/05/0188 „Konstruktivismus a jeho aplikace v integrovaném pojetí přírodovědného vzdělávání“ a jeho podpůrného projektu Specifického výzkumu PdF UHK 2123/2005 „Analýza inovačních tendencí v integrovaných přírodovědných výukových projektech všeobecného vzdělávání“, zaměřených na podporu hledání optimálních řešení. Projekty se orientují zejména na kurikulární odraz využívání nových látek a technologií v každodenním životě, projektově orientovanou výuku přírodovědných předmětů, na návrhy a odladění jednoduchých školních pokusů, podporujících konstruktivistický přístup ve výuce a na další inovace počítačem podporovaných školních experimentů s integrovaným přírodovědným zaměřením. Zůstane chemie pouze samostatným předmětem, zavedeným od osmého ročníku ZŠ nebo najde „společnou řeč“ s ostatními přírodovědnými předměty? Nabízejí se oblasti integrace např. jako tzv. nediferenciace v 6. a 7. ročníku ZŠ nebo integrace už získaných znalostí ve vyšších ročnících SŠ [1 - 3].

[1] Bílek, Martin a kol. *K integraci v přírodovědném vzdělávání*. Hradec Králové : Gaudeamus, 2001.

[2] Nezvalová, Dana. *Některé trendy pregraduální přípravy učitelů*. Olomouc: Vydavatelství Univerzity Palackého, 2001.

[3] Bílek, Martin. O integracji nauczania przedmiotów przyrodniczych. In *Práce naukowe WSP w Częstochowe, Seria: Chemia i ochrona środowiska 2002 z. VI., Częstochowa*: WSP, 2002.

4P04

VYUŽITÍ VZORCŮ A MODELŮ VE VÝUCE CHEMIE

Milan Marek, Karel Myška, Karel Kolář

Pedagogická fakulta UHK, Hradec Králové, karel.myska@uhk.cz

Pro názornou výuku chemie je nezbytné využívání různých typů vzorců a modelů, umožňujících vyjádřit vzájemné spojení atomů a jejich prostorové uspořádání v molekule. Ve výuce chemie na základních a středních školách se k tomuto účelu používají různé typy konstitučních, konfiguračních a konformačních vzorců nebo materiálních modelů. Soudobý intenzivní rozvoj informačních technologií pak vytváří prostor pro počítačové modelování struktury látek a jejich reakcí. V souvislosti s tím lze v brzké době očekávat postupné zavádění počítačových modelů do výuky chemie na střední i základní škole. Tomuto procesu by měl předcházet průzkum stavu využívání vzorců a modelů ve výuce chemie na různých typech škol.

Na školách východočeského regionu bylo realizováno dotazníkové šetření, vztahující se problematice vzorců a modelů ve výuce chemie. Průzkumu se zúčastnilo téměř 700 respondentů, žáci a studenti ze základních škol a gymnázií byli zastoupeni ve srovnatelném počtu. Z dotazníkového šetření je zřejmé, že vzorce a modely jako prostředky názorné výuky jsou na základní škole a gymnáziu široce využívány, nicméně na obou typech škol se téměř nepoužívá počítačů k charakterizaci a popisu struktury

látek. V této souvislosti je záměrem autorů postupné zavádění nových typů počítačových modelů zobrazujících určitou vlastnost molekuly (property maps) do výuky chemie na gymnáziu i na základní škole.

Jak průzkum ukázal, na obou typech škol se ve výuce chemie běžně pracuje s různými typy vzorců a modelů. Na základních školách a gymnáziích jsou tak vytvořeny velmi dobré podmínky pro zavádění informačních technologií do výuky za účelem názorné prezentace struktury a vlastností látek.

[1] Bláha, K., Drátovský, M., Pachmann, E.: *Pojmy obecné chemie na základní a střední škole*, ÚÚ VPP, Praha 1985
[2] Marek, M.: *Modelování ve výuce chemie*, Gaudeamus, Hradec Králové (v tisku)

4P05

PROBLEMATIKA VÝPOČTOVÝCH ÚLOH VE VÝUCE CHEMIE

Vladimír Sirotek, Milan Kraitr, Petra Kutnerová

Katedra chemie, Fakulta pedagogická, Západočeská univerzita v Plzni,
Veleslavínova 42, 306 14 Plzeň, Česká republika,
sirotek@kch.zcu.cz

Nezbytnou součástí náplně učiva chemie na všech stupních škol jsou výpočtové úlohy. Řešení výpočtových úloh ve výuce je důležitým prostředkem k objasnění a procvičování kvantitativních vztahů v chemii, umožňuje rozvíjení a upevňování základních chemických poznatků a přispívá k rozvoji logického myšlení.

Výuka výpočtových úloh je do značné míry specifická. Jedná se o úlohy, ve kterých studenti uplatňují znalosti a dovednosti z příbuzných oborů - matematiky a fyziky. Příspěvek se snaží zmapovat některé aspekty výuky výpočtových úloh z pohledu učitelů a studentů vybraných plzeňských středních škol. Bylo provedeno dotazníkové šetření u téměř dvou stovek studentů a 40 učitelů chemie.

Výsledky průzkumu současného stavu výuky výpočtových úloh v chemii v zásadě odpovídají běžně převládajícím názorům na tuto problematiku. Předpokladem pro zvládnutí výpočtů v chemii je schopnost logického myšlení, které není u většiny žáků výrazně rozvinuté. Tím se řadí výpočtové úlohy mezi obtížné učivo. Zvládnutí této problematiky ze strany studentů rovněž závisí na míře procvičení a zažití látky. Svou roli také sehrává zaměření školy nebo třídy. Studenti mají k výuce také poměrně nízkou motivaci, neboť dané učivo nepovažují za důležité a do praxe nepotřebné. Snahou učitelů chemie na všech stupních by mělo být alespoň částečně snížit poměrně malou oblíbenost výpočtových úloh u studentů a přispět k jejich lepšímu pochopení.

4P06

ORIENTÁCIA ŠTUDENTSKEJ VEDECKEJ ODBORNEJ AKTIVITY NA ÚZEMNÚ OCHRANU PROSTREDIA V OKOLÍ ZÁVODU DUSLO, A. S. ŠAĽA

Melánia Feszterová

Univerzita Konštantína Filozofa, Katedra chémie,
Tr. A. Hlinku 1, 949 74 Nitra mfeszterova@ukf.sk

V príspevku vychádzame z toho, že obsah výchovy by mal v hlavných rysoch sledovať aj otázky starostlivosti a ochrany o životné prostredie. Mal by usmerňovať konanie človeka, predvídať vývoj kvality prostredia vo vzájomných súvislostiach. Rovnako by mal byť zameraný na kontrolu stavu jednotlivých zložiek životného prostredia. Mladú generáciu treba už od útleho veku pripravovať a pozitívne motivovať príkladmi neporušenej prírody zo svojho bezprostredného okolia. Významnú úlohu v učebnom procese zohrávajú motivačné aktivizujúce metódy, ktoré majú osobitné postavenie vo vyučovaní chémie. Využívaním týchto metód uskutočňujeme cieľ - rozvíjať tvorivosť žiakov. K jeho splneniu je potrebné zabezpečiť vhodné podmienky, t. j. tvorivú atmosféru, ktorá sa dá realizovať v rámci študentskej vedeckej odbornej činnosti. V našom príspevku predkladáme poznatky a skúsenosti zo sledovania znečisťovania ovzdušia a následného vplyvu na pôdu v okolí závodu Duslo, a. s. Šaľa.

Tento príspevok vznikol za podpory grantov CGA č. VI/14/2003 a CGA č. VI/11/2004.

[1] Baráth, O., Feszterová, M., Pomšár, Z.: *Zborník príspevkov z XVII. medzinárodnej konferencie DIDMATECH 2004*, Rzeszów, s. 432-436 (2004).
[2] Baráth, O., Feszterová, M.: *Zborník z 4. medzinárodnej konferencie Environmentálna výchova a vzdelávanie na školách v Slovenskej republike*, Nitra, 2004

4P07

EFEKTÍVNOSŤ ĎALŠIEHO VZDELÁVANIA UČITEĽOV CHÉMIE NA SLOVENSKU PROSTREDNÍCTVOM DIŠTANČNEJ VZDELÁVACEJ TECHNOLÓGIE

[a]Mária Ganajová, [b]Mária Lichvárová

[a]*Prírodovedecká fakulta UPJŠ, Ústav chemických vied,*
Moyzesova 11, 041 54 Košice
ganajova@kosice.upjs.sk
[b]*Fakulta prírodných vied UMB, Katedra chémie,*
Tajovského 40, 974 01 Banská Bystrica
lichvar@fpv.umb.sk

Prírodovedecká fakulta UPJŠ v Košiciach v spolupráci s Fakultou prírodných vied UMB v Banskej Bystrici uskutočnili „Ďalšie vzdelávanie učiteľov chémie s využitím dištančnej vzdelávacej technológie“ v rámci národného projektu KEGA č. 3/106403, ktorý je podporovaný Mini-

sterstvom školstva Slovenskej republiky.

Cieľom projektu bolo poskytnúť učiteľom chémie základných škôl poznatky o chémii bežného života (Kyseliny a zásady bežného života, Chémia nás živí, Chémia vody, pôdy a vzduchu) a možnostiach ich konkrétneho zaradenia do výučby. Témy sú vo forme hypertextov sprístupňované na stránkach http://kekule.science.upjs.sk a http://www.fpv.umb.sk/kat/kach/

Overovanie efektívnosti dištančného vzdelávania uskutočňujeme dotazníkovou metódou a formou odpovedí učiacich sa na zadané úlohy k jednotlivým témam. *Doposiaľ sme z vyhodnotenia priebežného dotazníka účastníkov dištančného vzdelávania zistili:*

- dištančné vzdelávanie je veľmi vhodnou a prijateľnou formou vzdelávania pre učiteľov z praxe (100%),
- nadobudnuté poznatky využijú učitelia priamo vo vyučovacom procese a pri príprave žiakov na chemickú olympiádu,
- dištančný kurz je spestrením ich práce, je výborný pre vzbudenie záujmu a vybočenie zo zaužívanej rutiny.

Veľmi zaujímavé a efektívne boli aj vyplnené žiacke dotazníky v rámci chemického krúžku, ktorý v priebehu vzdelávania viedli učitelia so svojimi žiakmi. Z odpovedí žiakov sme sa dozvedeli:

- chemické experimenty boli pre žiakov veľmi zaujímavé, pretože: *„Sú netradičné“!*
- žiaci prejavili záujem (54%) vyskúšať si chemické experimenty aj doma a ukázať ich rodičom, kamarátom.

Dištančné vzdelávanie bolo ukončené obhajobou záverečných prác a ich prezentáciou. Každý učiteľ prezentoval a obhajoval pred komisiou a ostatnými kolegami svoju prácu, čím vlastne obohatil ostatných kolegov s vlastnou problematikou, ktorú rozpracoval vo svojej práci.

V závere chceme poďakovať Kultúrnej a edukačnej grantovej agentúre Ministerstva školstva Slovenskej republiky za finančnú podporu na realizáciu tohto projektu KEGA č. 3/106403 „Ďalšie vzdelávanie učiteľov chémie s využitím dištančnej vzdelávacej technológie.“

[1] Ganajová, M., Kukľová, L., Lichvárová, M.: Ďalšie vzdelávanie učiteľov chémie s využitím dištančnej vzdelávacej technológie. In: *Chemické listy, č.8*, 2004, s.556

[2] Ganajová, M., Kukľová, L.: Dištančné vzdelávanie a chemické experimenty. In: *Zborník z konferencie Didchem. Rajecké Teplice, Chemické Rozhľady, 5*, 2004, č.5, s. 158-162

4P08

INTERAKTIVNÍ CENTRA POZNÁVÁNÍ

Bohuslav Dušek[a], Miroslav Novák[b]

[a]*VŠCHT v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, Bohuslav.Dusek@vscht.cz*
[b]*NTM, Kostelní 1320/42, 170 00 Praha 7, miroslav.novak@ntm.cz*

V České republice, podobně jako v ostatních vyspělých zemích Evropy a Ameriky, se stává závažným problémem s budoucími technologickými a ekonomickými důsledky stálý pokles zájmu mládeže o studium přírodovědných a technických oborů. Hledají se cesty, jak znovu vzbudit zájem o tyto oblasti lidského poznání. Jednou z možností je odstranit obavu žáků z obtížných a někdy nepochopitelných přírodovědných vyučovacích předmětů již na základních a středních školách tím, že jim umožníme setkávat se s přírodovědnými a technickými problémy a jejich řešením cestou vlastních (vlastnoručně získaných) zkušeností a to ne ve školním prostředí, které svou oficiálností může některé žáky odrazovat, ale spontánní návštěvou instituce, která jim takové poznání zábavnější formou zprostředkuje.

Tuto roli mají plnit interaktivní centra poznání (ICP), ve světě známá jako Interactive Science Centra nebo Science Learning Centra. Jsou to jakési kombinace technických muzeí, domů techniky, domů dětí a mládeže a vzdělávacích institucí. V těchto centrech mohou žáci sami nebo pod odborným dohledem získat některé přírodovědné poznatky i ověřit si platnost přírodních zákonů. V České republice se myšlenkou vybudovat ICP při Národním technickém muzeu v Praze zabývá skupina pracovníků z pražských vysokých škol, Akademie věd a NTM již třetí rok. Byly vypracovány návrhy exponátů pro fyzikální i chemickou část centra, realizace je ale brzděna ekonomickými problémy.

4P09

CHEMICKÉ VZDĚLÁVÁNÍ A MODERNÍ TECHNOLOGIE

Hana Čtrnáctová

Univerzita Karlova v Praze - Přírodovědecká fakulta - Katedra učitelství a didaktiky chemie, Albertov 6, 128 40 Praha 2, e-mail: ctr@natur.cuni.cz

Nebývalý rozvoj chemické vědy i aplikované chemie v průběhu 20. století, vedl k tomu, že i v chemickém vzdělávání na všech jeho úrovních se stále více prosazují poznatky obecné chemie o jevech, látkách a dějích, které nejsou přímo dostupné pozorování, jako jsou poznatky o složení a struktuře atomů, molekul a krystalů a jejich změnách při chemické reakci. Zároveň se stávají součástí výuky i informace o vlastnostech a použití nově vyráběných látek a materiálů, o nových technologiích chemické výroby, o ochraně zdraví a životního prostředí apod.

Informační a počítačové technologie (ICT) umožňují skutečně názornou, odborně správnou a dostatečně rychlou

vizualizaci takového učiva chemie. Přitom jejich použití je možné v různých tématech učiva a v různých fázích výuky za současného splnění didaktických funkcí jako je funkce informační, formativní a instrumentální, zásada názornosti a získávání informací více smysly, funkce motivační a stimulační, ergonomická a řídící. Mezi nejvýznamnější reálné způsoby využití ICT v chemickém vzdělávání vzhledem k uvedeným funkcím patří:

- vyhledání informací, ilustrací a animací k danému tématu učiva chemie, nejčastěji prostřednictvím Internetu,
- tvorba vzorců a modelů molekul a krystalů látek, sestavování chemických aparatur s využitím vhodných chemických programů (ACD/ChemSketch, ISIS/Draw apod.),
- vizualizace učiva chemie, např. formou počítačové prezentace v programu PowerPoint nebo Impress, tvorba posterů a dalších názorných materiálů pomocí ICT,
- interaktivní programy pro výuku chemie, např. v hypertextových jazycích jako je HTML nebo s využitím multimediálního software jako Visual Basic,
- počítačem podporované chemické experimenty, které umožňují naměřit a zpracovat hodnoty veličin prostřednictvím vhodných čidel a počítačového softwaru,
- testování vědomostí a dovedností žáků a získávání objektivních zpětnovazebných informací.

Využívání ICT v chemickém vzdělávání tak umožňuje především snižování neproduktivního času ve prospěch času věnovaného produktivní činnosti a řízení výuky, získávání objektivních zpětnovazebných informací a využívání individuálního tempa učení podle dispozic žáka.

[1] Bílek, M.: *Vzdělávací a informační technologie v chemii*. PedF UHK, Hradec Králové (1998).
[2] Čtrnáctová, H., Poláková, L.: *Vizualizace učiva chemie - d prvky*. In: Aktuálny stav a vývojové trendy vo vyučovaní chémie (Sborník přednášek z mezinárodní konference DIDCHEM). PřF UK, Bratislava, s. 140-143 (2004).
[3] Kalhous, Z., Obst, O. a kol.: *Školní didaktika*. Portál, Praha (2002).

4P10

ASISTENT UČITELE ROZŠÍŘENÍ PEDAGOGICKÉ PRAXE BUDOUCÍCH UČITELŮ CHEMIE

Klečková Marta, Nevěčná Taťjana, Fadrná Veronika, Topičová Petra

Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého, tř.Svobody 8, 771 46 Olomouc, ČR, kleckova@prfnw.upol.cz

Již dlouhodobě jsou studenti učitelství chemie zapojováni do spolupráce PřF UP se základními a středními školami v regionu. Vytvořili jsme rozsáhlý projekt, který byl realizován ve 3 po sobě navazujících fázích.

V počáteční fázi jsme umožnili studentům gymnázií v Olomouci navštěvovat chemický kroužek - praktická cvičení, která probíhala v laboratořích PřF 1x týdně. Studenti SŠ postupně prošli všemi katedrami chemie, kde pro ně VŠ studenti připravili série experimentů.

V dalším roce chemické praktikum, probíhalo v laboratoři gymnázia. Praktikum během dvouletého cyklu vedli studenti učitelství chemie pod odborným vedením VŠ pedagogů a pod „dohledem“ (z bezpečnostních důvodů) učitele chemie z gymnázia. VŠ studenti si takto vyzkoušeli přímo ve školské praxi sérii laboratorních cvičení s řadou zajímavých experimentů, získali bohaté praktické pedagogické zkušenosti při práci s mladšími a staršími gymnazisty. Návody pro realizaci těchto experimentů byly metodicky zpracovány do 2 publikací [1,2].

Poslední fáze projektu byla zahájena v loňském akademickém roce. Do studijního plánu oboru učitelství chemie byl zařazen předmět Praktická výuka chemie, v rámci kterého studenti působí na 8 středních školách, se kterými PřF uzavřela smlouvu o spolupráci, jako **asistenti učitele**. Náplň činnosti je studentovi specifikována dle možností a potřeb na každé škole zvlášť. Jedná se o tyto činnosti: příprava a vedení laboratorních cvičení-povinná výuka, chemických praktik-volitelný předmět, v oblasti zájmové činnosti-vedení chemického kroužku, příprava studentů na chemickou olympiádu, vedení prací SOČ, apod.

Dosažené výsledky projektu:

VŠ studenti pozitivně hodnotí tento způsob přípravy na budoucí povolání. Také reference ze škol jsou velmi příznivé a všechny školy chtějí ve spolupráci pokračovat a mají zájem i o větší počet asistentů učitele.

Projekt byl realizován za podpory grantu FRVŠ B 30/2004.

[1] Durčáková, Z., Klečková, M., Friedecká, P., Nevěčná, T., Ovesná, M., Pfofová, K., Stuchlíková, K., Šimků, M., Šulová, A., Zárubová, L., Ševčík, J., Barták, P., Bednář, P., Friedecký, D., Gavenda, A., Kameníček, J., Kvítek, L.: *Chemické pokusy pro žáky základních škol*. 178 s., Olomouc: Alga Press, 2001.
[2] Durčáková, Z., Klečková, M., Friedecká, P., Nevěčná, T., Ovesná, M., Pfofová, K., Stuchlíková, K., Šimků, M., Šulová, A., Zárubová, L., Ševčík, J., Barták, P., Bednář, P., Friedecký, D., Gavenda, A., Kameníček, J., Kvítek, L.: *Chemické pokusy pro studenty středních škol*. 175 s., Olomouc: Alga Press, 2001.

4P11

PILULKA - DOBRO I ZLO!

Bohumil Kratochvíl

Ústav chemie pevných látek,
Vysoká škola chemicko-technologická v Praze,
Technická 5, 166 28 Praha 6, bohumil.kratochvil@vscht.cz

Předložený projekt je zaměřen na přednášky vysokoškolských pedagogů na středních školách o aktuálních chemických a příbuzných tématech. Účelem projektu je osvěžení středoškolské výuky chemie, budování kladného vztahu k chemickému a příbuznému průmyslu a ovlivnění budoucí orientace středoškoláka při výběru vysoké školy. K uskutečnění projektu je nutný oboustranný zájem a dohoda vysokoškolského pedagoga se střední školou. Uvedený

projekt není podporován žádným grantem a vychází pouze z autorova přesvědčení o jeho užitečnosti.

Autor má úspěšné zkušenosti s projektem na gymnáziích v Humpolci a Pelhřimově, kde přednášel sám a kromě toho zorganizoval úspěšnou přednášku prof. Rudolfa Zahradníka [1] na gymnáziu v Humpolci.

Při ústní prezentaci bude na ukázku uvedena přednáška: Pilulka - dobro i zlo!, kde je z pohledu chemika probrána aktuální farmaceutická tématika. Výběr tématu souvisí s bakalářským studijním programem: Syntéza a výroba léčiv, který otvírá VŠCHT Praha, ve spolupráci s firmou Zentiva a.s., od školního roku 2005/2006.

[1] Zahradník R., *Chem. Listy, 98*, 823-824 (2004).

4P12

KRÁTKODOBÝ STUDIJNÍ POBYT VE VÝROBNÍCH ZÁVODECH JAKO SOUČÁST DALŠÍHO VZDĚLÁVÁNÍ UČITELŮ CHEMIE

Milan Kraitr, Vladimír Sirotek, Václav Richtr, Vladimír Nápravník

Katedra chemie, Fakulta pedagogická, Západočeská univerzita v Plzni, Veleslavínova 42, 306 14 Plzeň, Česká republika, kraitr@kch.zcu.cz

Další vzdělávání učitelů chemie obvykle nezahrnuje praktické seznámení učitelů s moderními technologiemi a novými výrobky. To je jeden z důvodů, proč výuka chemie na všeobecně vzdělávacích školách nedostatečně odráží význam chemie pro společnost. Je do značné míry odtržena od technické reality, nevěnuje dostatečnou pozornost aplikacím chemie v každodenním životě. K řešení této situace má přispět náš projekt krátkodobého studijního pobytu učitelů (KSPU) ve výrobních závodech, jehož model ověřujeme v rámci projektu FRVŠ 1894/2005/B/a. KSPU navrhujeme zařadit jako činnost, kterou lze zvyšovat odbornou kvalifikaci v rámci dalšího vzdělávání učitelů a jejich kariérního systému.

Pilotní projekt KSPU realizujeme na podzim 2005 jako tři celodenní zaměstnání po 8 hodinách ve 4 výrobních závodech (Česká rafinérská, rafinérie Kralupy; Kaučuk Kralupy; Lovochemie Lovosice; Plzeňský Prazdroj) se skupinou 25 učitelů chemie středních a základních škol. Jeho těžištěm jsou aktivity ve výrobních provozech, zahrnující prezentace výrobních postupů a výrobků i jejich aplikací. Součástí jednotlivých akcí jsou semináře zaměřené na uplatnění chemických výrob ve výuce chemie. Volba závodů a tematického zaměření modelového KSPU klade důraz na význam a reprezentativnost zvolených výrob, tematickou pestrost a na modernost a technickou úroveň zvolených výroben, které patří ke špičce českého chemického a potravinářského průmyslu. Kromě nejmodernějších technologií anorganických, organických, palivářských a biotechnologií připravujeme do budoucna rozšíření programu i o tematiku zneškodňování starých ekologických zátěží a využití druhotných surovin.

Podporováno grantem FRVŠ 1894/2005/B/a.

4P13

ALTERNATÍVNE FORMY VYUČOVANIA ORGANICKEJ CHÉMIE NA STREDNÝCH ŠKOLÁCH

Ján Valkovič, Marta Sališová

Katedra organickej chémie, Prírodovedeckej fakulty Univerzity Komenského v Bratislave, Mlynská dolina CH-2, 84215 Bratislava, salisova@fns.uniba.sk

V súčasnosti prebieha na Slovensku reforma stredoškolského vzdelávania, ktorú rieši program Milénium [1]. Hlavným mottom programu Milénium je hľadanie spôsobov, ako pri vyučovaní aplikovať rozvíjanie kľúčových kompetencií, vzbudzovanie zájmu o vzdelávanie, posilňovanie kreativity a schopnosti učiť sa, spolupracovať, identifikovať a riešiť problémy, komu-nikovať. Budeme preto porovnávať pojmy „kurikulum a gramotnosť“. Keďže v súčasnosti je možné vyhľadať faktografické informácie pomerne ľahko a z rôznych zdrojov, je veľmi dôležité vedieť dané informácie využiť v praktickom živote.

K tomu by mohlo pomôcť aj rozdelenie vyučovania na dve úrovne - základnú úroveň kde by v prvých dvoch ročníkoch strednej školy získali žiaci základné poznatky z jednotlivých predmetov, vrátane chémie, teda základnú gramotnosť. V pokročilej úrovni, ktorá pokrýva druhé dva ročníky štvorročného štúdia na strednej škole, by žiaci získavali pomerne hlboké vedomosti v odbore, v ktorom sa chcú špecializovať a postupne ho rozvíjať.

V našom príspevku chceme prezentovať vybrané úlohy, rozdelené do troch typov: motivačné, problémové a experimentálne. Motivačné úlohy by mali slúžiť na vzbudenie záujmu a motivovaniu žiakov k ďalšiemu štúdiu chémie a malo by sa v nich odzrkadliť praktické využívanie chemických produktov v každodennom živote. Zároveň by mohli byť akýmsi minimálnym štandardom z predmetu chémia, ktorý musí zvládnuť každý žiak. Problémové úlohy sú určené hlavne pre žiakov, ktorých už predmet zaujal a sú ochotní riešiť aj náročnejšie problémy - teoretického i praktického charakteru, keďže chémia je veda experimentálna.

Poďakovanie: Autori ďakujú Slovenskej grantovej agentúre za finančnú podporu grantu KEGA - 3/115803.

[1] Milénium - *Národný program výchovy a vzdelávania v Slovenskej republike na najbližších 15 až 20 rokov*

4P14

PUBLIC IMAGE OF CHEMISTRY

Attila E. Pavlath

Western Regional Research Center, Albany, California, USA

Our everyday life would be drastically different without the many benefits chemistry bestowed on us. Nevertheless, the media vilifies chemistry with big headlines frequently on unfounded information and when proven wrong, the

correction is not forthcoming or hidden in obscure places. The lecture will describe what chemistry has done for us. It will give a realistic picture of the benefits and problems. Since the negative attitude by the media is not limited to any geographical location, we must address the problem by worldwide unified efforts. The lecture will describe a plan that can and should be done everywhere to assure that chemistry will get the proper recognition for its achievements.

4P15

E-LEARNING V DIAGNOSTICKÉ FÁZI VVP NA ZÁKLADNÍ A STŘEDNÍ ŠKOLE

Jan Veřmiřovský [a], Martina Vrkočová [b]

[a] *Matiční gymnázium Ostrava, Dr.Šmerala 25, Ostrava, 728 04, e-mail: janvermirovsky@seznam.cz*
[b] *ZŠ Šilheřovice, Kostelní 230, Šilheřovice, 747 15, e-mail: M.Vrkocova@seznam.cz*

Autoři se snaží v příspěvku navrhnout alternativu diagnostiky osvojování vědomostí žáky využitím počítačového programu, který byl vytvořen firmou Sanit s.r.o. V programu, který lze zařadit mezi COL (Computer On-line Learning) si testy vytváří pedagog a není tak odkázán na již vytvořené testy. Při tomto typu zkoušení je možno uplatnit individuální přístup. Učitel má k dispozici také možnost okamžitého vyhodnocení, se kterým může seznámit žáka, stejně jako s jeho správnými, nebo naopak chybnými odpověďmi. Autoři příspěvku by také chtěli seznámit zájemce s anketou o vhodnosti implementace e-learningu do výchovně-vzdělávacího procesu, která byla provedena se studenty a žáky, se kterými byl tento program vyzkoušen.

5P01

MONITORING OF THE ELEMENT CONTAMINANTS IN THE ENVIRONMENTAL SAMPLES

Gabriela Holéczyová[1], Viera Vojteková[2], Kvetoslava Rimárová[1], Alexander Hudák[3]

[1]*Department of Hygiene, P. J. Šafarik University, Faculty of Medicine, Šrobárova 2, 041 80 Košice, SR, e-mail: holeczy@kosice.upjs.sk*
[2]*Department of Chemistry Sciences, P. J. Šafarik University, Faculty of Sciences, Moyzesova 11, 041 54 Košice, SR,*
[3]*Regional Office for Health Service, Ipeľská 1, 042 20 Košice, SR*

The aim of the study was the monitoring of the contamination and quality evaluation of the river waters, the river sediments and the fishes. For the determination of the element contents in the rive water has been applied ET AAS method by using graphite furnace (Cd, Cu, Hg, Pb) and also hydride generation (As). ED XRF analysis was used for Cu, Cr, Cu, Pb determination in the river sediments. Cd, Pb determination in the fishes and Zn in the water was made by Polarography. All used methods are suitable for the heavy metals determination in searching environmental samples. LOQ (3LOD) values in used methods are from ten to thousand times lower than the limits of Slovak Standard Norm for individual components of the environment.

The waters from 4 rivers, the sediments from 3 rivers, the livers and the muscles form 5 fish species - whiting, dace, grayling, roach, trout were analysed. As, Cd, Cr, Cu, Hg, Pb contents from river waters are not higher than the limits according to Slovak Standard Norm for water flows and the other surface waters. Zn contents are higher than allowed limits. Determined element contents in river sediments are higher in the comparison with mean value for the same elements in river sediments in Slovak Republic. Maximum contents of Cd, Hg, Pb in the fishes exceed Standard Limits for the muscle of fresh water fishes.

5P02

ŘÍZENÍ ENVIRONMENTÁLNÍCH DOPADŮ APLIKACE PRŮMYSLOVÝCH HNOJIV

Ladislav Svoboda

Fakulta chemicko-technologická,Univerzita Pardubice, Katedra anorganické technologie, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice, Česká republika, e-mail: ladislav.svoboda@upce.cz

Zvyšování využitelnosti živin z průmyslových hnojiv a potlačení negativních dopadů jejich aplikace na životní prostředí lze dosáhnout dělením celkových ročních dávek do několika dílčích dle potřeby rostlin v jednotlivých fázích vegetačního vývoje, opakovanou aplikací kapalných hnojiv vykazujících rychlý účinek a vysokou účinnost foliární výživy, případně využitím inhibitorů nitrifikace a procesů přeměny

dusíkatých složek na plynné produkty. První dva způsoby vyžadují opakované vjíždění do porostů, třetí je specifický pro hnojiva dusíkatá. Alternativním přístupem je použití hnojiv s pozvolnou účinností, která po jednorázové aplikaci uvolňují živiny postupně, aniž by docházelo k jejich nadměrnému hromadění v půdě spojenému se zvýšením jejich toxických účinků na pěstované kultury a k následným ztrátám vyplavením či únikem do ovzduší. Na trhu je spotřebitelům nabízen stále početnější sortiment hnojiv s pomalým, resp. řízeným uvolňováním živin, jejich většímu rozšíření dosud brání vyšší cena. Proto je snahou uvést na trh produkt, který nalezne uplatnění nejen mezi malospotřebiteli, ale zejména v zemědělské velkovýrobě.

K dosažení tohoto cíle se snaží přispět i výzkum prováděný na Univerzitě Pardubice v oblasti granulovaných hnojiv s řízeným uvolňováním živin. V laboratorním měřítku připravená obalovaná NPK hnojiva vykazují nejen mnohanásobné zpomalení rozpouštění, ale i zvýšenou pevnost a odolnost granulí vůči spékání.

Tato práce vznikla v rámci projektu MSM0021627501 podporovaného MŠMT České republiky.

5P03

RIZIKOVÉ PRVKY OKOLIA RUDNIAN A KROMPÁCH

Ján Tomáš[1], Daniel Bajčan[1], Alena Vollmannová[1], Dušan Zaujec[2], Klaudia Jomová[3]

[1]Katedra chémie, Fakulta biotechnológie a potravinárstva, Slovenská poľnohospodárska univerzita, Tr. A. Hlinku 2, 949 76 Nitra, e-mail: jan.tomas@uniag.sk
[2]Katedra pedológie a geológie, Fakulta agrobiológie a potravinových zdrojov, SPU, Tr. A. Hlinku 2, 949 01 Nitra,
[3]Katedra chémie, Fakulta prírodných vied, Univerzita Konštantína Filozofa, Tr. A. Hlinku 1, 949 01 Nitra

Zaťaženie pôd perzistentnými stopovými látkami sa stalo v období po obmedzení výroby v ŽB Rudňany a KO Krompachy jedným z najvýznamnejších problémov ochrany pôdy a životného prostredia. Z uvedeného potom vyplýva, že tieto látky v životnom prostredí človeka - v ovzduší, pôde, vode a požívatinách je vážnym - hygienickým problémom [1].

Arzén z hľadiska hodnotenia pôdnej hygieny patrí medzi najviac rizikové prvky Stredného Spiša v porovnaní s ostatnými sledovanými rizikovými prvkami [2]. Na jedenástich hĺbkach celkový obsah As prekročil limitnú hodnotu C a na trinástich hĺbkach bola prekročená limitná hodnota B. Celkový obsah As bol v rozsahu pri prekročení limitu B a C 35,58 - 124,30 mg.kg^{-1}. Prekročenie limitnej hodnoty As v rastlinách bolo zaznamenané v zrne pšenice ozimnej a kapusty repkovej pravej.

Ortuť považujeme za jeden z najzávažnejších faktorov životného prostredia [3]. Ortuť v anorganickej forme je dobre sorbovaná pôdnym humusom a ílovými minerálmi. Pri nízkom pH sorbuje ortuť prevažne humus a pri vyššom pH ilové minerály. V danom regióne hlavne v okolí Rudnian má ortuť v pôde jednoznačne antropický pôvod, čo dokumentuje príčinnú súvislosť s imisiami. V analyzovaných pôdach na všetkých stanovištiach (celkove 12 - 24 hĺbok) je prekročená limitná indikačná hodnota A pre celkový obsah v pôde (0,3 mg.kg^{-1}). Priemerný obsah celkového obsahu Hg v pôdach sledovaného súboru je 13,505 mg.kg^{-1}. Celkový obsah Hg v pôdach je extrémne vysoký, ale jeho mobilizovateľné formy tvoria len malý podiel na ňom. Obsah Hg v rastlinách bol prekročený len u kapusty repkovej pravej.

Táto práca vznikla s podporou grantu agentúry VEGA číslo 1/2428/05

[1] Zima, M., Dubnická, Z.: Effect of heavy metals on chlorophyll and growth of spring barley a spinach. ACTA PHYSIOLOGIAE PLANTARUM, No. 3, Vol. 25, p. 133, 2003 PL ISSN 0137-5881
[2] Lahučký, L. et al.: Effect of chromium on plant production ability. Agriculture (Poľnohospodárstvo), Volume 51, 2005 (5), p. 274 - 280, ISSN 0551-3677
[3] Tóth, T. et.al.: Kontaminácia pôd v okolí chemického podniku Chemko Strážske. Chemické listy, 98 (8), 2004, s. 1063. ISSN 0009-2770

5P04

PLASMA HEATING FOR PROCESSING THE METAL-BEARING OXIDIS WASTES

Bartusek S., Brožová S.

Department of Environmental Protection in Industry, Centre of Advanced Innovation Technologies
VŠB-Technical University of Ostrava, Czech Republic;
e-mail: stanislav.bartusek@vsb.cz

Ironmaking and steelmaking is always associated with origination of waste that presents for the entire metallurgical process either reversible and/or reusable material or lost waste not applicable in further production. At present the waste from iron- and steelmaking finds hardly applicability as secondary raw material. The majority of solid waste is deposited outside of plant as a dumping loss. For the reasons of economy and environmental protection such dumping loss should be recovered as much as possible otherwise such expensive waste depots additionally menace our surrounding world.

Evidence has been given that the low-temperature plasma could replace the existing routes of less-suitable pyrometallurgical treatment of such wastes that are therefore processed by hydrometallurgical route.

The metallurgical issue of implementation of plasma heating into iron- and steelmaking.

A profound investigation into literature allowed to draw the following conclusions on application of plasma heating in melting iron and steel:

- *At the processes of ladle and tundish metallurgy.* At VÍTKOVICE, a.s. the plasma applications with original own torch are under preparation both for heating-up of liquid steel in ladle and for the metallurgical processes in integrated system of the

secondary metallurgy (ISSM).

- *At elimination of undesirable non-ferrous metals from the iron-based melts*. Accomplishment of the laboratory heats in the common plasma-working site of the FMMI VSB- TU Ostrava and the Division 940 - Researeh and Development has confirmed the preconditions for possible elimination of such deleterious elements by evaporation from the melts. The effect of plasma heating on composition of the anode metal, as-melted down, has been examined with some 24 trial heats whereby the results have confirmed here the phenomena of removal of the non-ferrous metals such as Cu, Sn, As and Sb and brought some new data on the possible routes of reduction especially of lead and zinc by plasma heating.
- *At effective processing of the metal-bearing oxidic waste originating at steel- and ironmaking.*
  At VÍTKOVlCE, a.s. the laboratory experiments have been carried out by using a gas torch to verify the possible ways of processing the waste (iron scales and sludges from oxivite route) available at Division 200. The experiments were run with the original testing facility installed in cooperation with the FMMI VSB-TU Ostrava and VÍTKOVlCE, a.s. The product of processing is metal whose chemical composition can be governed by reasonable selection of materials and/or additives to be charged (C-bearing materials, lime) [3]. Utilization of the plasma torcb (reactor) seems to be suitable even from the viewpoint of environmental protection as the waste processing route provides both metal of desirable chemical composition and also inert slag to be used in building industry. Moreover, lead and zinc caught-up in the fi1ters (and/or from recyc1ing) can be used as concentrate at the non-ferrous metal works [1].

Accordingly, this application of plasma heating provides almost a waste-free melting route of iron and steel.

[1] Brožová, S.: In.: International Scientific Conference, Maschinery Technology - production technology 99, Súlov, 1999, p.177-180. ISBN 80-7100-652-1
[2] Bartusek S., Brožová S.: Chemické listy, č.8, ročník 98, p. 716. ISSN 0009-2770

5P05

POUŽITÍ ANALYTICKÝCH METOD PŘI STUDIU STAVU FOTOSYNTETICKÉHO APARÁTU POD VLIVEM GLOBÁLNÍCH KLIMATICKÝCH ZMĚN

Jiří Kalina, Vladimír Špunda

Katedra fyziky, Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita v Ostravě, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava 1, e-mail: jiri.kalina@osu.cz

Jedním z hlavních faktorů prostředí, který významně ovlivňuje růst a vývoj rostlin, je koncentrace CO_2 v atmosféře. Působení zvýšené [CO_2] obecně vede jak ke zvýšení kapacity fotosyntézy (pozitivní aklimace) spojené se zvýšeným využitím absorbované energie ve fotochemických reakcích, tak i k poklesu kapacity fotosyntézy (aklimační deprese).

Mechanismy a příčiny aklimační deprese fotosyntézy jsou stále předmětem diskusí a hypotéz. Aklimační deprese fotosyntézy bývá například způsobena sníženou aktivitou nebo množstvím enzymu *Rubisco*. K projevům aklimační deprese patří také změny obsahu pigmentů asimilačního aparátu, především zvýšený obsah zeaxantinu. Všechny vyšší rostliny, zelené a hnědé řasy vykazují rychlou, reverzibilní vzájemnou přeměnu zeaxantinu, anteraxantinu a violaxantinu označovanou jako xantofylový cyklus. V nedávné době se otázka role zeaxantinu a xantofylového cyklu dostala do popředí zájmu v souvislosti s pozorností, která je soustředěna na studium mechanismů ochrany fotosyntetického aparátu proti poškození nadměrnou intenzitou fotosynteticky aktivní radiace. Antioxidačních vlastností β-karotenu, luteinu a v poslední době i zeaxantinu se v poslední době využívá i v medikamentech.

Pro stanovení jednotlivých karotenoidů jsme využili metody vysokoúčinné kapalinové chromatografie. Pro stanovení aktivity či množství enzymu *Rubisco* jsme využili spektrofotometrickou metodu, která spočívá v měření rychlosti oxidace NADH (časové změny absorbance při 340 nm) či stanovení absorbance při 270 nm.

Tato práce byla podpořena grantem „CzechCarbo - studium cyklu uhlíku v terestrických ekosystémech ČR v souvislostech Evropského projektu CARBOEUROPE (VaV/640/18/03)“.

5P06

CYP1A1 EXPRESSION IN PRIMARY CULTURES OF RAT HEPATOCYTES AND HepG2 CELLS IS RESTRICTED BY MICROTUBULES DISRUPTORS

Zdeněk Dvořák, Radim Vrzal, Jitka Ulrichová

Institute of Medical Chemistry and Biochemistry, Faculty of Medicine, Palacky University Olomouc, Hnevotinska 3, 77515 Olomouc, Czech Republic

The expression of drug metabolizing cytochromes P450 is controlled by several nuclear receptors, including aryl hydrocarbon receptor (AhR), pregnane X receptor (PXR), constitutive androstane receptor (CAR), vitamin D receptor (VDR), and glucocorticoid receptor (GR). The family CYP1A enzymes, a prominent players in the drug metabolism as well as in chemically induced carcinogenesis, is under the control of AhR receptor.

Recently, we have demonstrated that microtubules disarray by colchicines and nocodazole results in the impairment of CYP2B6, CYP2C8/9 and CYP3A4 inducible expression in primary cultures of human hepatocytes [1]. We have found that colchicine and nocodazole restricts glucocorticoid receptor nuclear import in human hepatocytes, which leads to the inhibition of GR transcriptional

activity and down-regulation of PXR and CAR receptors and their target CYP genes[1]. The proposed mechanism is the activation of c-Jun-N-terminal kinase by colchicine, which in turn inactivates GR by phosphorylation at Ser226[2]. Furthermore, microtubules disruption in human cervix carcinoma cells (HeLa) led to the rapid dose- and time- dependent GR degradation mediated by proteasome-ubiquitin system[3].

In the present work, we examined the effect of microtubules disruptors on AhR dependent CYP1A1 regulation in human hepatoma cells (HepG2). We found that both compounds caused time and dose dependent inhibition of dioxin-mediated CYP1A1 expression in HepG2 cells, as revealed by i) Western blot analyses of CYP1A1 protein, ii) RT-PCR analyses of CYP1A1 mRNA, iii) Measurements of CYP1A1 catalytic activity in cell culture. In addition, we observed the inhibition of CYP1A1 mRNA dioxin-dependent expression in primary cultures of rat hepatocytes. Several papers described the oscillation of AhR transcriptional activity in the course of the cell cycle, the activity being decreased in G2/M transition. Thus, our findings seem to be interesting, as we observed CYP1A1 down-regulation in hepatocytes, i.e. non-proliferating cells.

This research was supported by grant MSM 6198959216 from the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic, and by grant GACR 303/04/P074 from the Grant Agency of the Czech Republic.

[1] Dvorak, Z., et al.: Colchicine down-regulates cytochrome P450 2B6, 2C8, 2C9, and 3A4 in human hepatocytes by affecting their glucocorticoid receptor-mediated regulation. Mol. Pharmacol, 2003, 64(1), p. 160-9.
[2] Dvorak, Z., et al.: Microtubule disarray in primary cultures of human hepatocytes inhibits transcriptional activity of the glucocorticoid receptor via activation of c-jun N-terminal kinase. Biomed. Pap. Med. Fac. Univ. Palacky-Olomouc, Czech Republic, 2004,148(2), p. 135-9.
[3] Dvorak, Z., et al.: Disruption of microtubules leads to glucocorticoid receptor degradation in HeLa cell line. Cell Signal, 2005, 17(2), p. 187-96.

5P07

ÚLOHA OBALOV PRI BALENÍ A SKLADOVANÍ POTRAVÍN

Stanislav Sekretár, Štefan Schmidt, Lucia Zahradníková

Katedra potravinárskej technológie FCHPT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava,
e-mail: stanislav.sekretar@stuba.sk

Obal je prostriedok, ktorý chráni pred škodou, ktorú by výrobok mohol utrpieť alebo spôsobiť. Súčasne obal uľahčuje manipuláciu s výrobkom, jeho odbyt a skladovanie [1]. Pri balení potravín musia obaly spĺňať viac funkcií - ochrannú, racionalizačnú, komunikačnú, ekologickú, ekonomickú a záručnú.

Ochranná funkcia je založená na mechanických a bariérových vlastnostiach obalových materiálov, vďaka ktorým obal chráni výrobok pred mechanickým poškodením, pred vplyvom prostredia (svetlo, teplota, vlhkosť, mikróby, prienik pachov a pod.), prípadne chráni pred nežiadúcim účinkom výrobku na okolie (aróma výrobku). *Racionalizačná funkcia* spočíva vo vytvorení manipulačnej jednotky vhodnej na prepravu, manipuláciu, skladovanie, predaj a odbyt. *Komunikačná funkcia* zabezpečuje vizuálnu komunikáciu medzi výrobcom, dopravcom a spotrebiteľom prostredníctvom informácií uvedených na obale. *Ekologická* funkcia má zabezpečiť recykláciu obalov alebo v ich bezpečnú likvidáciu. *Ekonomická* funkcia je v opti-malizácii nákladov na obal v pomere k hodnote zabaleného tovaru. *Záručná* funkcia má dať zákazníkovi istotu, že v obale je originál a nie falzifikát. Ochranná funkcia obalu je v príspevku demonštrovaná na príklade skladovania rastlinných olejov v rôznych obaloch na svetle a v tme.

Táto práca vznikla s podporou VEGA projektu 1/2392/05.

[1] Kačeňák, I.: Základy balenia potravín. ARM 333, Bratislava 2001, 198 s.

5P08

POLYPHENOLIC COMPOUNDS IN COLOURED PEA SEEDS

Judita Bystrická, Mária Timoracká, Alena Vollmannová, Silvia Melicháčová, Bronislava Škarbová*

Department of Chemistry, Faculty of Biotechnology and Food Sciences, Slovak University of Agriculture,
Tr. A. Hlinku 2, 949 76 Nitra, Slovakia,
e-mail: Alena.Vollmannova@uniag.sk
**State Veterinary and Food Institute, Akademická 3, 94901 Nitra, Slovakia*

Legumes are good sources of proteins, polysaccharides, micronutrients, but also of a variety of bioactive non-nutrients compounds - flavonoids [1]. The nutritional function of flavonoids is not confirmed, but positive influence on human health is indisputable. Their antioxidant properties, great abundance in our diet, and their probable role in the prevention of various diseases associated with oxidative stress are reputable during past years.

Our attention is being given especially to four representative flavonoids: kaempherol, apigenin, genistein and daidzein. These flavonoids were studied in the seeds of coloured varieties of dry pea. Their contents were determined according to the modified method by [2]. Isocratic HPLC analysis with UV DAD detection after acid hydrolysis of samples was performed. The differences of flavonoid contents in individual pea varieties were not significant. The determined values of flavonoids in green peas were: daidzein 0-1,746 $mg.kg^{-1}$, genistein 0,060-0,598 $mg.kg^{-1}$, kaempherol 0,459-1,484 $mg.kg^{-1}$, apigenin 0,101-0,336 $mg.kg^{-1}$. Yellow varieties of pea contained between 0,037-0,360 $mg.kg^{-1}$ daidzein, 0,014-0,071 $mg.kg^{-1}$ genistein, kaempherol 0,309-1,314 $mg.kg^{-1}$, apigenin 0,16-0,411 $mg.kg^{-1}$.

Total polyphenol content was determined spectrophotometrically with Folin-Ciocalteaus phenol reagent. Varieties ACHAT among analysed green peas and XANTOS among yellow peas were the richest sources of polyphenols.

This work was supported by State Programme of Research and Development „Food - quality and safety“ No 2003SP270280E010280E01

[1] Troszynska, A., Ciska, E., Czech Journal of Food Science, 20, (1), p. 15-22, (2002)
[2] Wang, G., Kuan, S.S. et al., Agric. Food Chem., 38, p. 185-190, (1990)

5P09

SAMČÍ ZNAČKOVACÍ FEROMONY ČMELÁKŮ, JEJICH ISOLACE A BIOSYNTÉZA

Irena Valterová[1], Lucie Cahlíková[2], Anna Luxová[1], Blanka Kalinová[1], Oldřich Hovorka[1]

[1]Ústav organické chemie a biochemie, Akademie věd České republiky, Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha;
[2]Ústav chemie přírodních látek, VŠCHT, Technická 5, 166 28 Praha

Značkovací feromony jsou používány samci k označení území, v němž v letním období vyhledávají samičky. Feromon je produktem cefalické části labiální žlázy a je druhově specifický. Jde vždy o více či méně bohatou směs látek. V některých případech bylo složení sekretu labiální žlázy využito i v chemotaxonomii v případech obtížné morfologické rozlišitelnosti druhů.

Naše studie navazuje na starší práce provedené ve Skandinávii [1]. V současné době máme k dispozici vzorky téměř všech Evropských druhů čmeláků, z nichž zhruba třetina nebyla po chemické stránce dosud popsána. Kromě rozmanitosti druhové a chemického složení feromonu studujeme též závislost tohoto složení na věku samců. Bylo zjištěno, že feromonové složky se syntetizují ve žláze velmi mladých samců (do stáří 5 dnů). Po této době jsou látky ve žláze jen skladovány a postupně uvolňovány při každodenním patrolování samců. S tím souvisejí i nalezená maxima množství látek v extraktech žláz (5-7 dní věku) a jejich biologická aktivita. V elektroantenografických testech odpovídala tykadla panenských samiček čmeláka zemního s ma-ximální intenzitou na extrakt žláz čtyřdenních samců.

Po chemické stránce jsou složky značkovacích feromonů nejčastěji alifatické alkoholy, aldehydy nebo estery mastných kyselin. Pro objasnění způsobu jejich biosyntézy jsme aplikovali deuteriem značené mastné kyseliny různých délek a identifikovali vzniklé metabolity. První výsledky naznačují, že feromonové složky jsou biosyntetizovány ze zásobních lipidů, které jsou do žlázy transportovány z tukového tělesa a posléze ve žláze modifikovány.

[1] Bergström G., Svensson B. G., Appelgren M., Groth I.: In: *Biosystematic of Social Insects*, (Howse B., Clément J.-L., ed.,) Academic Press, London and New York 1981, p. 175.

5P10

ČESKÝ PIVOVÁREK A JEHO VÝROBEK UPROSTŘED OCEÁNU

Tomáš Zoufalý, Petr Brynych

Výzkumný ústav pivovarský a sladařský, a.s., Lípová 15, 120 44 Praha 2, Česká republika,
e-mail: zoufaly@beerresearch.cz

V roce 2003 Výzkumný ústav pivovarský a sladařský, a.s., (VUPS) dodal speciální mikropivovar pro výrobu piva z mladinového koncentrátu a potřebný mladinový koncentrát na Velikonoční Ostrov. Zároveň zajistil uvedení tohoto zařízení do provozu a zahájil výrobu prvního piva v historii na území Velikonočního Ostrova (v místním jazyce Rapa Nui), včetně zajištění komplexního technického a technologického zázemí.

Velikonoční Ostrov leží přibližně uprostřed mezi chilskou pevninou a Tahiti. Od roku 1885 ze správního hlediska náleží k Chile, avšak místní hrdí a sebevědomí obyvatelé Rapa Nui (udávaný počet 3.540) inklinují podstatně více k Polynesii.Velikonoční Ostrov byl, jak je známo, organizací UNESCO prohlášen pro své jedinečné sochy (moais) a petroglyfy jako Světové kulturní a přírodní dědictví. To je patrně hlavním důvodem zájmu turistů z celého světa o tuto pevninu v oceánu o rozloze 180 km^2 s příjemným subtropickým podnebím.

Mikropivovar dodaný VUPS má výrobní kapacitu 300 hektolitrů piva za rok. Výrobu ležáku českého typu mikropivovar zahájil v říjnu 2003 za osobní účasti specialisty VUPS a pod jeho vedením. Do prvního čepování tohoto českého piva nebylo točené pivo na Ostrově vůbec k dostání. Pivo je možné podávat ryze přírodní, nefiltrované se všemi vitaminy, biogenními prvky a dalšími zdraví prospěšnými látkami kvasinkových buněk. Pro případ potřeby, či požadavku zákazníků, lze pivo také filtrovat.

Český zlatavý mok na Rapa Nui nese název Pivo Iorana - Original Czech Beer Lager. Iorana je v místním jazyce univerzální pozdrav. Popřejme tedy tomuto novodobému průkopníkovi slávy českého piva v Polynesii „Dej Bůh štěstí!“ a „Iorana korua!“

5P11

DERIVATIVES OF AMINOMETHYLENEBISPHOSPHONIC ACID - CHEMISTRY AND BIOLOGY

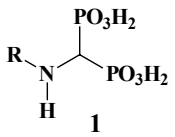
Paweł Kafarski

Department of Bioorganic Chemistry,Faculty of Chemistry, Wrocław University of Technology, Wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław, Poland

Bisphosphonates are a class of hydrolytically stable compounds with a wide range of physiological activity. The most potent of these compounds contain a nitrogen atom in their side chains. Some of them are in current use as safe and efficacious drugs for treatment of bone disorders [1]. A

number of bisphosphonates exhibit herbicidal activity [2]. Very recently they were also shown to be promising agents for treatment of parasitic protozoa infections like human African trypanosomiasis, malaria, leishmaniasis and amoebic desyntery [3].

Because of various and promising biological properties bisphosphonates are receiving con siderable interest and the requirement for new structures is still growing. N-Substituted aminomethylenebisphosphonic acids (compounds 1) constitute a subclass of bisphosphonates of especially interesting cghemical and biological properties.



1

These properties will be shortly outlined within the scope of the presentation.

[1] Rodan, G. A.; Martin, T. J.: Science, 289 (2000) 1508.
[2] Kafarski, P.; Lejczak B.; Forlani, G.: Heteroatom Chem. 11 (2002) 449.
[3] A. Montalvetti, A., Bailey, B. N., Martin, M.B., Severin, G. W., Oldfield, E., Docampo, R.: J. Biol. Chem. 276 (2001) 33930.

5P12

TECHNOLÓGIE PRE RÁDIOAKTÍVNE ODPADY A VYRAĎOVANIE JADROVÝCH ZARIADENÍ

Vasil Koprda

Katedra environmentálneho inžinierstva, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava 1, Slovenská republika, e-mail: vasil.koprda@stuba.sk

Podstatná časť rádioaktívnych odpadov (RAO) vzniká pri výrobe elektrickej energie v jadrových elektrárňach a pri vyraďovaní jadrových zariadení z prevádzky. Z hľadiska ochrany zdravia človeka a ochrany životného prostredia je potrebné venovať nakladaniu s RAO zodpovedajúcu pozornosť. Nakladaním s RAO sa rozumie integrovaný systém zahrňujúci zber, triedenie, skladovanie, spracovanie, úpravu, manipulácie, prepravu a uloženie. Základná stratégia nakladania s RAO je založená na nasledovných princípoch:

- úprava do formy vhodnej na uloženie, alebo na dlhodobé skladovanie,
- ukladanie nízko- a stredne aktívnych RAO do povrchového úložiska,
- dlhodobé (desiatky rokov) skladovanie RAO neuložiteľných do povrchového úložiska,
- príprava hlbinného úložiska pre vyhorené a už termalizované jadrové palivo (VJP) a iné vysoko aktívne rádioaktívne odpady.

Táto stratégia je v plnom súlade s medzinárodným Dohovorom o bezpečnom nakladaní s RAO a s VJP, ratifikovaným SR v r.1998 a je súčasťou Národnej správy pripravenej v rámci uvedeného Dohovoru pre MAAE.

Príspevok sa zaoberá tvorbou a nakladaním s RAO v prevádzkovaných blokoch AE Bohunice a AE Mochovce. Poukazuje na produkciu jednotlivých druhov RAO (plynných kvapalných a pevných a na súčasné trendy ich tvorby v rámci modernizácie AE, ako aj sekundárnych odpadov vznikajúcich v spojitosti s dekontaminačnými, demontážnymi a demolačnými prácami na jadrových zariadeniach ktoré sú t. č. vo vyraďovaní.

Spracovanie a úprava RAO zahrňujú činnosti, ktorých cieľom je zvýšiť bezpečnosť a ekonomickú efektivitu nakladania s nimi a pripraviť ich na uloženie, resp. ďalšie skladovanie. Väčšina týchto činností je sústredená v jadrovom zariadení Technológie na spracovanie a úpravu RAO, ktoré prevádzkuje SE-VYZ. Toto zariadenie zahŕňa najmä dve bitúmenačné linky a Bohunické spracovateľské centrum (BSC) RAO. Bitúmenačné linky, každá s kapacitou 120 L/hod, sú určené na bitúmenáciu koncentrátov z JE typu VVER a z JE-A1 do 200 L sudov. Na jednej z liniek sa uskutočňuje úprava pre diskontinuálnu bitúmenáciu ionexov a kalov. BSC slúži ako ťažiskové zariadenie pre finálnu úpravu RAO na uloženie. Okrem cementácie sa tu používa spaľovanie, fragmentácia, vysokotlaké lisovanie a koncentrovanie odparovaním. Výsledným produktom je pevnými a spevnenými RAO naplnený špeciálny vlákno-betónový kontajner (VBK), ktorý vyhovuje podmienkam uloženia v republikovom úložisku RAO v Mochovciach, kde sú upravené RAO bezpečne izolované od životného prostredia s použitím inžinierskych a prirodzených bariér. Súhlas k prevádzkovaniu úložiska vydal ÚJD v r. 2001 a dnes je v ňom uložených viac ako 1000 kusov VBK.

Podľa kalkulácií vyprodukuje jeden blok JE počas projektovej doby prevádzky 2 500 ton VJP a 3 700 ton vysoko aktívnych RAO, o ktorých sa predpokladá, že budú musieť byť uložené v hlbinnom úložisku (HÚ). Slovensko sa aktívne podiela na spolupráci krajín pri vývoji regionálneho HÚ v rámci 6. rámcového programu Európskej únie.

Táto práca vznikla s podporou VEGA projektu 2/5051/25 a VEGA projektu 1/1381/04.

5P13

POUŽITIE PEVNÝCH EXTRAHENTOV V RÁDIOCHEMICKEJ NEUTRÓNOVEJ AKTIVAČNEJ ANALÝZE

Mária Lučaníková [a,b], Jan Kučera [b], Ferdinand Šebesta [c]

[a]*Katedra jaderné chemie FJFI ČVUT v Praze, Břehová 7, 115 19 Praha 1, e-mail: lucanikova@fjfi.cvut.cz*
[b]*Oddělení jaderné spektroskopie ÚJF AV ČR, Řež, 250 68 Řež, e-mail: kucera@ujf.cas.cz*
[c]*Centrum pro radiochemii a radiační chemii ČVUT v Praze, Břehová 7, 115 19 Praha 1, e-mail: ferdinand.sebesta@fjfi.cvut.cz*

Pevné extrahenty sa v posledných päťdesiatich rokoch úspešne používajú na separáciu a koncentrovanie rôznych prvkov (hlavne zo vzoriek vôd) pred ich stanovením použitím rôznych analytických techník. Možnosti ich

použitia v rádiochemickej neutrónovej aktivačnej analýze (RNAA) neboli doteraz dostatočne preskúmané aj napriek tomu, že ich požitie v RNAA v porovnaní s ostatnými separačnými metódami (najmä s kvapalinovou extrakciou) poskytuje rad výhod ako je jednoduchosť realizácie či možnosť mechanizácie a tým zníženie radiačnej záťaže, čo je dôležitý prvok z hľadiska radiačnej bezpečnosti.

Cieľom tejto práce bolo vyvinúť nové rádiochemické separačné postupy na stanovenie esenciálnych a toxických stopových prvkov (napr. As, Cd, Cu, Mo, Sb, Re, atď.) v biologických materiáloch s použitím pevných extrahentov „šitých na mieru“, ktoré boli pripravené začlením rôznych aktívnych zložiek do pojivej inertnej matrice modifikovaného polyakrylonitrilu (PAN). Boli pripravené a testované SPE materiály (solid phase extractant), ktoré obsahovali pevné extrakčné činidlá (napr. dimetylglyoxim) ako i SEX materiály (solid extractant) s kvapalnými aktívnymi zložkami (napr. metyl-trioktylamónium chlorid (Aliquat 336)) v PAN matrici. Tieto kompozitné materiály vykazujú dobré mechanické, chemické vlastnosti a radiačnú stabilitu.

Vyvinuté nové postupy RNAA boli validované analýzami s vhodnými referenčnými materiálmi a tak sú vhodné pre rutinné použitie v kontrole životného prostredia, biochemických a kosmochemických štúdiách.

Táto práca bola podporená GA ČR projektom 203/04/0943 a grantu CTU0509014.

5P14

N-ALKANES AND POLYAROMATIC HYDROCARBONS IN AEROSOL SAMPLES

Petra Kotianová, Hans Puxbaum

Institute for Chemical Technologies and Analytics, Vienna University of Technology, Getreidemarkt 9/164/AC - Analytical Chemistry, A-1060 Vienna, Austria, e-mail: kotianov@centrum.sk

The aim of this work was the determination of selected n-alkanes and PAHs in aerosol samples in the PM10 fraction. The components of interest are a set of non and weakly polar compounds used as markers for vehicular exhaust, plant debris, wood smoke, natural gas combustion as applied in CMB model.

The aerosols were sampled on the quartz fibre filters (Pallflex™). The organic analytes are released from the filter by extraction with cyclohexane in ultrasonic bath. After sample-treatment, they were determined via GC-MS (GC HP-6890; MS HP-7683). The sample was injected in splitless mode at 300°C (2 min). The GC was equipped with a deactivated fused silica precolumn (1 m x 0.32 mm) and a capillary column DB-5 MS (30 m x 0.25 mm I.D. x 0.25 µm film thickness). The temperature program: 50°C for 2 min, by 8°C/min to 98°C, by 6°C/min to 290°C for 20 min. Helium was used as a carrier gas. MS was operated in SIM mode (70eV).

The concentrations of target analytes from atmospheric aerosol samples collected at four sampling sites in Vienna, Austria, in 2004 as well as from selected aerosol sources samples will be presented and interpreted.

5P15

DISTRIBÚCIA ŤAŽKÝCH KOVOV V PÔDACH APLIKÁCIOU SUBSTRÁTU PO VÝROBE BIOPLYNU

Tomáš Tóth[1], Richard Pospišil[2], Klaudia Pariláková[3], Janette Musilová[1], Judita Bystrická[1]

[1]Katedra chémie, Fakulta biotechnológie a potravinárstva, Slovenská poľnohospodárska univerzita, Tr. A. Hlinku 2, 949 76 Nitra, e-mail: tomas.toth@uniag.sk
[2]Katedra rastlinnej výroby, Fakulta agrobiológie a potravinových zdrojov, SPU, Tr. A. Hlinku 2, 949 01 Nitra,
[3]Katedra krajinného plánovania a pozemkových úprav, Fakulta záhradníctva a krajinného inžinierstva, SPU, Tr. A. Hlinku 2, 949 01 Nitra

Jedným z možných spôsobov pri využívaní alternatívnych zdrojov energie je aplikácia vyhnitého substrátu po kontinuálnej výrobe bioplynu a následne sledovanie jeho komplexného vplyvu na stav pôdnej hygieny so zreteľom na input ťažkých kovov. Plošný vstup rizikových látok do pôdy prestavuje aplikácia melioračných hmôt, ktoré sú spravidla vyrábané na báze odpadov s obsahom rizikových látok [1]. Sem patria čistiarenské odpadové kaly a dnové sedimenty vodných diel, ako aj biokal, získaný na kontinuálnej kofermentácii živočíšnych exkrementov. I keď ich používanie je upravené „Záväzným predpisom MP SR o podmienkach priamej aplikácie stabilizovaných čistiarenských kalov a dnových sedimentov na pôdu“, takéto zúrodnené pôdy a hlavne plodiny pestované na týchto pôdach je nutné dlhodobo monitorovať na obsah ťažkých kovov [2].

Výskyt ťažkých kovov v rastlinách súvisí s ich prítomnosťou v pôdach. Miera účinku ťažkých kovov na produkčný a bioenergetický potenciál rastlín závisí od ich množstva a povahy [3].

Na základe rozborov pôd na obsah ťažkých kovov možno konštatovať, že aplikáciou maštaľného hnoja a biokalu došlo k zvýšeniu obsahu medi, kadmia, chrómu a niklu v sledovaných pôdach v porovnaní s kontrolným variantom. Obsah olova v porovnaní s kontrolným variantom poklesol v prípade variantu 25 t/ha maštaľného hnoja a 50 t/ha biokalu aplikovaného na jar. Aplikácia 50 t/ha maštaľného hnoja a 50 t/ha biokalu na jeseň mala za následok zvýšenie obsahu olova v porovnaní s kontrolným variantom. Obsah zinku a kobaltu sa aplikáciou organických komponentov nezvýšil. Z hľadiska hodnotenia pôdnej hygieny vyplýva, že prekročenie limitnej hodnoty pre celkový obsah ťažkého kovu v pôde sme zaznamenali v prípade obsahu kadmia, chrómu, niklu a kobaltu.

Táto práca bola riešená v rámci projektu VEGA č. 1/1345/04 - Výskum využitia biokalu po kontinuálnej kofermentácii živočíšnych odpadov a energetických plodín pre udržanie racionálnej intenzity rastlinnej výroby a kvality prírodného prostredia

[1] Chlpík, J., Pospišil, R.: Plošná charakteristika mechanických a chemických vlastností pôdy na Výskumnej báze Slovenskej poľnohospodárskej univerzity v Nitre, lokalita Kolíňany. In : Acta fytotechnica et zootechnica, roč. 7, 2004, č. 1, s. 6 - 10, ISSN 1335-258X

[2] Holobradý, K., Ilka, P.: Methodology of marked bilge and drain sediments aplication to soils (1997). VOPU, Bratislava, 50 pp.
[3] Tomáš J., Vollmannová, A.,Tóth, T., Musilová, J., Bajčan, D.: The evaluation of soil hygiene on Middle Spiš (2004). In: Soil Antripization VIII., Phytopedon, Bratislava, ISBN 80-89128-12-2

5P16

FERMENTATION OF CABBAGE-APPLE JUICES BY LACTOBACILLUS PLANTARUM AND BIFIDOBACTERIUM LONGUM

Jolana Karovičová, Zlatica Kohajdová, Drahomíra Lukáčová, Mária Greifová, Gabriel Greif, Kristína Kukurová, Jarmila Lehkoživová

Department of Food Technology, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovak Republic,
e-mail: karovicova@chtf.stuba.sk

Fermented foods and beverages are defined as those products that have been subordinated to the effect of microorganisms or enzymes to cause desirable biochemical changes [1]. Lactic acid bacteria are industrially important microbes that are used all over the world in a large variety of industrial food fermentations. Their contribution in these fermentation processes primarily consists of the formation of lactic acid from the available carbon course resulting in a rapid acidification of the unprocessed food material, which is a critical parameter in the preservation of these products [2].

In this work we prepared lactic acid fermented cabbage-apple juices inoculated by two species of lactic acid bacteria (*Lactobacillus plantarum* CCM 7039 and *Bifidobacterium longum* CCM 4990) and spontaneously fermented cabbage-apple juice. During fermentation the analytical and sensory parameters were followed. From the measured results emerged that the most suitable starter culture for preparation of cabbage-apple juices was Lactobacillus plantarum CCM 7039 (highest production of lactic acid, sufficient decreasing of pH value, highest intensity of harmonic taste and acceptance of odour and taste). We recommend to stop the fermentation process of this juice in 72th h of fermentation.

[1] Blandino A., Al-Aseeri M. E., Pandiella S. S., Cantero D., Webb C., Food Res. Inter., 36, 527-543, (2003).
[2] Hugenholtz, J., Smit E., Current Opinion in Biotechnol., 13, 497-507, (2002).

5P17

DERIVÁTY HYDRAZINU V UCHÁČI NEUWIRTHOVU (GYROMITRA NEUWIRTHII)

*Pudil F., Šrůta P., *Uvíra R., **Maryška M., ***Janda V.

**Ústav chemie a analýzy potravin,*
e-mail: pudilf@vscht.cz,
***Ústav skla a keramiky*
****Ústav technologie vody a prostředí*

Metodou GC-MS s dávkováním technikou SPME byly analyzovány těkavé látky z čerstvých a sušených plodnic houby *Gyromitra Neuwirthii* nalezené v roce 2004 a 2005 v Brdských lesích. Nález je dokumentován snímky plodnice a mikrosnímky výtrusů a byl určen pracovníky České mykologické společnosti. Sušený vzorek z r. 2005 je uložen v mykologickém herbáři Národního muzea pod evidenčním číslem PRM 902 256.

V sušeném vzorku byly detegovány homology gyromitrinu. V analyzovaném materiálu měl největší zastoupení N-methyl-N-formylhydrazon hexanalu, dále byly nalezeny homologické deriváty dvou izomerů pentanalu, heptanalu, oktanalu, nonanalu a dekanalu. Velmi pravděpodobně byl přítomen i N-methyl-N-formylhydrazon fenylacetaldehydu a cyklické deriváty hydrazinu.

Za podmínek analýzy nebyl nalezen samotný gyromitrin, tj. typická toxická složka z některých druhů rodu Gyromitra.

5P18

ZDROJE SELÉNU VO VÝŽIVE OBYVATEĽSTVA NITRIANSKEHO KRAJA

Alžbeta Hegedűsová[a], Ondrej Hegedűs[a], Klaudia Jomová[a], Tomáš Tóth[b], Andrea Vargová[a]

[a] Katedra chémie FPV UKF Nitra, Tr. A. Hlinku 1, 949 74 Nitra, ahegedusova@ukf.sk,
e-mail: kjomova@ukf.sk, hegeduso@zoznam.sk, Andrea.Vargova@post.sk
[b] Katedra chémie FBP SPU Nitra, Tr. A. Hlinku 2, 949 74 Nitra, Tomas.Toth@uniag.sk

Početné epidemiologické štúdie predpokladajú, že nízka hladina obsahu Se v krvi človeka môže súvisieť so zvýšeným rizikom vývoja nádorových a kardiovaskulárnych ochorení. Predpokladané mechanizmy účinku Se zahŕňajú stimuláciu imunitného systému, ovplyvnenie metabolizmu karcinogénov, ochranu pred poškodením kyslíkovými radikálmi, modifikáciu proteínov v organizme, ochranu metabolických enzýmov a priamu väzbu na DNA. Na Slovensku sa obilniny podieľajú 13,7%-mi na percentuálnom zastúpení v dennom príjme Se občanov [1,3].

V predkladanej práci sa na základe analýzy vzoriek obilia (pšenica) a pôdneho substrátu hodnotil stav obsahu Se v pôdach a v pšenici dopestovanej v Nitrianskom kraji. Vzorky boli odobraté priamo pri žatve z 28 lokalít. Se v pšenici a v pôde sa stanovil metódou AAS za použitia

elektrotermickej atomizácie pár. Priemerný obsah Se v pšenici vypestovanej v Nitrianskom kraji bol 49,7Ķg/kg, viac ako jeho priemerný obsah na Slovensku (28,9Ķg/kg)[2]. Celoslovenský priemer sa nedosiahol v severnej časti Nitrianskeho kraja. Priemer celkového obsahu selénu v pôdnych substrátoch bol nadlimitný -1mg/kg (limitná hodnota 0,8mg/kg), pritom na 15 lokalitách hladina celkového obsahu selénu nedosiahla limitnú hodnotu. Dôkazom toho, že príjem selénu je limitovaný jeho formou v pôde a pôdnymi vlastnosťami je severná časť Nitrianskeho kraja, kde pri nadlimitných obsahoch selénu v pôde jeho obsah v pšenici bol nedetekovateľný.

Táto práca bola podporovaná z výskumnej úlohy VEGA 1/1325/04.

[1] Koutník, V.: Výživa, 49, 72 - 73, (1994)
[2] Kadrabová, J., Maďarič, A.: Výživa a zdravie 42, 50 - 52, (1997)
[3] Vollmannová,A., Lahučký,L., Tomáš,J., Tóth,T.: Acta fytotechnica et zootechnica,6, 29-32, (2003)

5P19

HYGIENICKÝ STAV VYBRANÝCH PÔDNYCH PREDSTAVITEĽOV Z HĽADISKA OBSAHU ŤAŽKÝCH KOVOV V REGIÓNOCH BEZ LOKÁLNEHO ZNEČISTENIA

Janette Musilová, Radovan Stanovič, Judita Bystrická, Ladislav Lahučký, Pavol Trebichalský

Katedra chémie, Fakulta biotechnológie a potravinárstva, Slovenská poľnohospodárska univerzita, Tr. A. Hlinku 2, 949 76 Nitra, e-mail: musilova@afnet.uniag.sk

Pri posudzovaní pôdnej hygieny sme monitorovali parcely s regionálnym znečisťovaním ovzdušia bez veľkých a stredných emisných lokálnych zdrojov. Medzi takéto pozemky je zaradený okres Nitra (kataster Lehota, Veľký Cetín, Šurianky) [1].

Referenčná hodnota A a A1 stanovená pre Cd bola prekračovaná, pričom dosiahnuté výsledky stanovení pre Cd na jednotlivých parcelách boli v rozmedzí priemerov 0,87 - 2,38 $mg.kg^{-1}$ (celkový obsah) a 0,202 - 0,480 $mg.kg^{-1}$ (obsahu vo výluhu 2M HNO_3). Zvýšený obsah Cd v pôdach oblastí s regionálnym znečisťovaním ovzdušia pochádza z agrokontaminatov, najmä fosforečných hnojív, kompostov, odpadov atď., čo potvrdzuje aj kontaminácia Cd v povrchovej vrstve pôdy. Zvýšený obsah Cd v hodnotených pôdach je evidentný aj z porovnania obsahu Cd v pôdach SR, pričom je výrazný pokles v porovnaní hĺbok odberu 0,0-0,1m až 0,35-0,45m. [2], [3]

Obsahy Pb v hodnotených pôdach sú prakticky na úrovni pozaďových koncentrácií našich pôd a sú podstatne nižšie ako referenčné hodnoty A a A_1. Podľa viacerých prác má Pb vysokú afinitu k tvorbe stabilných zlúčenín, čím je v pôde fixovaný.

Priemerné obsahy Ni v pôdach sa približujú k referenčnej hodnote A pre nikel, pričom v niektorých parcelách, ako to dokumentujú maximálne hodnoty, limit A prekračujú. Priemerné hodnoty Ni stanovené vo výluhu 2M HNO_3 sú nižšie ako A_1.

[1] Tomáš, J., Vollmannová, A., Tóth, T., Lazor, P., Musilová, J.: Content of heavy metals in soils in relation on soil hygiene. In: Chemické listy, roč. 97, 2003, č. 8, s. 801. ISSN 0009-2770
[2] Tóth, T. a kol.: Kontaminácia pôd v okolí chemického podniku Chemko Strážske. In: Chemické listy, roč. 98, 2004, č. 11, s. 1063. ISSN 0009-2770
[3] Hegedüsová, A., Hegedüs, O., Valšíková, M.: Pohyb kadmia v systéme pôda - rastlina. Kvalita rostlinné produkce : Současnost a prespektivy směrem k EU. VÚRV, Praha, únor 2003., s. 115 - 122. ISBN 80-86555-22-4

5P20

ANALYSIS OF BIOGENIC AMINES IN FOODS AND THEIR PRODUCTION BY SOME STRAINS BACTERIA

Gabriel Greif, Mária Greifová, Jolana Karovičová

Katedra potravinárskej technológie, FCHPT STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, e-mail: gabriel.greif@stuba.sk

A method for determination of hygienically important components (putrescine, cadaverine, histamine and tyramine) present in foods and cultivation media was developed and tested. RP-HPLC method on NUCLEOSIL C18 column was used for this determination, with the mobile phase methanol : acetonitril : water at a ratio 2:1:1 (v/v/v) and detection in UV - 254 nm. The limit of determination was 10 ng for putrescine, cadaverine, histamine and 20 ng for tyramine in solid samples, which corresponds to 1 or 2 $mg.kg^{-3}$ in whole product if sample weight was 10 g. Influence of NaCl content and initial pH of cultivation media on the growth and production of biogenic amines by *Enterobacter aerogenes, Enterobacter cloacae*, *Enterococcus faecalis and Enterococcus faecium* was evaluated as well. Growth curves and functions describing production of amines served for calculation of growth characteristics (specific growth rate μ_m, lag phase λ and time to achieve maximum μ_m M) and characteristics of production of amines (specific rate of production of amine (ν_P), time in which measurable amine concentration is produced (l_P) and time to achieve maximum (ν_P) M), respectively.

Influence of the environment on characteristics of the growth and production of amines was mathematically described and the resulting equation, after some approximation, enables us to predict behaviour of the bacteria under study in real samples.

5P21

ZMENY OBSAHU VYBRANÝCH FLAVONOIDOV V ZELENOM HRÁŠKU VO VZŤAHU K DOBE MRAZENIA

Alena Vollmannová[a], Ján Tomáš[a], Tomáš Tóth[a], Mária Timorracká[a], Bronislava Škarbová[b]

[a]Katedra chémie FBP SPU, Tr. A. Hlinku 2, 949 76 Nitra, SR, e-mail: Alena.Vollmannova@uniag.sk
[b]ŠVPÚ, Akademická 3, 949 01 Nitra, SR, e-mail: skarbova@svunitra.sk

Napriek tomu, že flavonoidy vo všeobecnosti nie sú považované za látky s nutričnou hodnotou, záujem o ne vzrastá pre ich priaznivé účinky na ľudské zdravie [1]. Jedným z ich zdrojov sú strukoviny. Napriek tomu, že zdravotníci odporúčajú konzumovať ročne 6,5 kg strukovín na obyvateľa, je súčasná spotreba na Slovensku necelých 2 kg [2]. Najfrekventovanejšou strukovinou v SR je hrach s ročnou produkciou asi 16 mil. ton. Využíva ako nielen ako potravina v ľudskej výžive, ale v suchom stave aj ako krmivo pre úžitkové zvieratá.

V spolupráci s producentmi mrazenej zeleniny sa sledovali zmeny v obsahu vybraných bioflavonoidov v 5 odrodách zeleného hrášku (Cezar, Joff, Fabundo, Primo, Favorit) v závislosti od odrody a od doby hlbokého zmrazenia pri teplote -18°C. Na stanovenie bioflavonoidov sa vybral postup prípravy vzorky podľa [3], ktorý sa následne modifikoval. Jednotlivé vzorky sa upravovali podľa horeuvedeného postupu a analyzovali v pravidelných časových intervaloch metódou HPLC s UV DAD detekciou.

Z hľadiska obsahov všetkých sledovaných flavonoidov v hrášku sa najoptimálnejšou javí odroda Fabundo. V priebehu 6 mesiacov poklesol obsah daidzeínu na 47-24%, genisteínu na 49% až nedetekovateľnú hodnotu, kemferolu na 90% až nedetekovateľnú hodnotu a apigenínu na 32% až nedetekovateľnú hodnotu vo všetkých odrodách mrazeného hrášku.

Táto práca bola podporovaná štátnym programom výskumu a vývoja „Potraviny - kvalita a bezpečnosť“ číslo 2003SP270280E010280E01.

[1] Magálová, T.: Bratisl. Lek. Listy, 100, (9), s. 503-514, (1999)
[2] Chrenková, M. et. al.: J. Farm. Anim. Sci., XXVII, s. 243-251, (1994)
[3] Guangjian Wang, Shia S. Kuan et al.: Agric. Food Chem., 38, s. 185-190, (1990)

5P22

STANOVENIE OBSAHU SELÉNU VIAZANÉHO V PROTEÍNOVEJ FRAKCII ZELENÍN

Ondrej Hegedűs[a,b], Alžbeta Hegedűsová [a,b], Andrea Vargová[a,b]

[a] Výskumný ústav zeleninársky, Andovská 6, 940 01 Nové Zámky, Slovenská republika
e-mail: valsikovam@vuznz.sk
[b] Katedra chémie FPV UKF, Tr.A. Hlinku 1, 949 76 Nitra, Slovenská republika,
e-mail: ahegedusova@ukf.sk

Ľudský organizmus pre svoje potreby najľahšie prijíma selén viazaný v organických zlúčeninách [1,2]. Do rastlín sa selén dostáva z pestovateľského substrátu, kde je prítomný vo forme anorganických zlúčenín, a postupne ho rastliny zabudovávajú cez selenocysteín do vlastných proteínov [2,3]. To znamená, že podstatná časť organicky zabudovaného Se sa nachádza v aminokyselinách (proteínoch), ktoré môžu byť izolované extrakčnými činidlami. V práci je popísaný spôsob stanovenia celkového množstva organicky viazaného selénu v zeleninách. Stanovenie sa uskutočnilo po izolácii proteínov z analyzovaného rastlinného materiálu. Izolácia sa robila extrakciou v pufrovanom roztoku a následným zrážaním bielkovín alkoholom z odstredeného extraktu. Nakoľko proteínová frakcia bola izolovaná z roztoku alkoholovým zrážaním, spolu s proteínmi sa čiastočne zrážali aj iné organické zlúčeniny. Z uvedeného dôvodu sa v izolovanej frakcii stanovoval obsah čistých proteínov ako zdroje organicky viazaného selénu. Selén sa stanovoval v izolovanej proteínovej frakcii metódou atómovej absorpnej spektrometrie technikou generovania hydridov (HG-AAS). Obsah selénu, viazaného v proteínovej frakcii analyzovaných zelenín sa určil prepočtom. Z výsledkov vyplýva, že celkový obsah semenami prijatého selénu sa nachádza v izolovanej proteínovej zrazenine.

Táto práca bola podporovaná štátnym podprogramom výskumu a vývoja SR „Potraviny - kvalita a bezpečnosť“ číslo 2003SP270280E010280E01.

[1] Baghour, M., Moreno, D.A., Hernandez, J., Castilla, N., Romero, L.: *Journal of Environmental Science and Health - part A 6, 37*, 1075 - 1085, (2002)
[2] Maďarič, A., Kadrabová, J.: *Bulletin potravinárskeho výskumu, 37*, 1998, č.1, 11-17, (1998)
[3] Tóth, T., Hegedűsová, A., Jomová, K., Vollmannová, A.: In: Výživa a potraviny pre tretie tisícročie, Nitra SPU, 238 - 241, (2004)

5P23

SORPCE OXOANIONTŮ VANADU NA STANDARDNÍM SLABĚ BAZICKÉM ANEXU A SORBENTU S AMINO-METHYL-GLUCITOLOVOU FUNKČNÍ SKUPINOU

Helena Parschová, Zdeněk Matějka, Kateřina Jurečková, Pavlína Krotká, Karel Bláha

Ústav energetiky, FTOP, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6
e-mail: parschoh@vscht.cz

Jedním z diskutovaných ekologických problémů dneška je znečištění podzemních a povrchových vod, zvláště pak těch, které slouží jako zdroje pitné vody. Tato práce je zaměřena na účinné odstranění oxoaniontů vanadu pod 0,1mg/l. Vanad je obsažen v ropě a uhlí. Jeho přítomnost byla zjištěna např. ve vodných výluzích elektrárenských popílků.

Slabě bazické anexy nejsou obecně selektivní k oxoaniontům a dochází tedy ke konkurenční sorpci doprovodných aniontů, což snižuje jejich sorpční účinnost. Při sorpci oxoaniontů pomocí sorbentu s amino-methyl-glucitolovou funkční skupinou se využívá dvou aktivních center. První je na OH-skupinách, kde dochází ke vzniku komplexu s oxoaniontem a druhé na dusíku, kde pokud je ionex v protonizované formě, dochází k elektrostatické interakci protonizovaného dusíku s oxoaniontem. V tomto případě se jedná o běžnou neselektivní iontovou výměnu.

V této studii byl sledován vliv vstupní koncentrace oxoaniontů vanadu, vliv doprovodných aniontů (chloridy, sírany) a vliv vstupní hodnoty pH roztoku na užitkové kapacity sorbentů. Veškeré pokusy byly prováděny kolonovými dynamickými zkouškami při specifickém zatížení $6V/Vo.h^{-1}$. Slabě bazický anex byl použit v protonizované formě. Sorbent s amino-methyl-glucitolovou funkční skupinou byl použit jak v protonizované formě, tak i ve formě volné báze.

Ze zjištěných výsledků byly stanoveny optimální sorpční a desorpční podmínky k odstranění oxoaniontů vanadu.

Tato práce vznikla v rámci řešení výzkumného záměru MŠMT České republiky MSM 604 613 7304

[1] Matějka Z., Parschová H., Ruszová P., Jelínek L., Houserová P., Mištová E., Beneš M., Hrubý M.: *Fundamentals and Applications of Anion Separations*, 249-261, (2004)

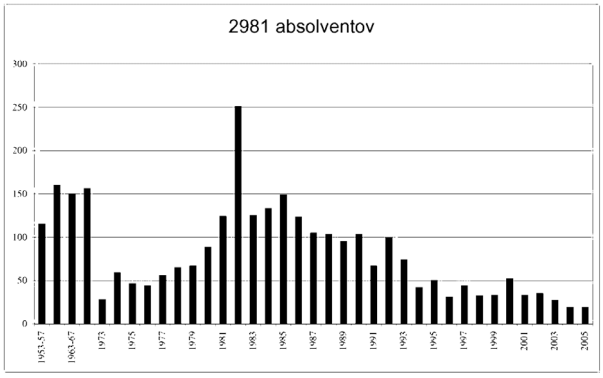
5P24

MINULOSŤ A SÚČASNOSŤ POTRAVINÁRSTVA NA FAKULTE CHEMICKEJ A POTRAVINÁRSKEJ TECHNOLÓGIE

Štefan Schmidt, Jarmila Hojerová, Fridrich Görner

Katedra potravinárskej technológie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie,
Slovenská technická univerzita, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
e-mail: stefan,schmidt@stuba.sk

Štúdium potravinárstva na Fakulte chemickej a potravinárskej technológie STU (prv Chemickotechnologickej fakulty SVŠT) v Bratislave má už 60-ročnú históriu [1]. Význam tejto vysokej školy pre potravinárstvo Slovenska najlepšie dokumentuje celkový počet absolventov potravinárskych špecializácií od roku 1953 (od toho roku sú presné záznamy) až po súčasnosť.



Obrázok informuje o tomto kumulovanom čísle, ktoré sa blíži k hodnote 3000. Je reálny predpoklad, že i v budúcnosti sa bude počet záujemcov o potravinársko-biochemický odbor pohybovať v intervale 1/3 až 40% z celkového počtu uchádzačov štúdia na FCHPT. V prednáške bude uvedená stručná štruktúra potravinárskeho štúdia od roku 1942, spomenuté budú aj najvýznamnejšie osobnosti potravinárskych chemikov a technológov, ktorí svojím vedeckým a pedagogickým profilom položili základy potravinárskeho štúdia a vedy na FCHPT-STU [2]. Spomenuté budú aj požiadavky praxe v podmienkach EÚ.

[1] Schmidt, Š.: Výuka potravinárstva na Fakulte chemickej a potravinárskej technológie. In: WORKSHOP 2004" - Slovenská chémia v 3. Tisícročí, 11.-13. február 2004 - FCHPT STU, Bratislava
[2] Görner, F.: osobné zdelenie

6P01

LABORATORNÍ PYROLÝZA ZBYTKOVÉ C9 FRAKCE

Petr Zámostný[a], Lucie Starkbaumová[a], Zdeněk Bělohlav[a], Tomáš Herink[b], Václav Chyba[a,c], Josef Šimek[c], Jaromír Lederer[c]

[a]Ústav organické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická, 166 28 Praha 6,
[b]Chemopetrol a.s., 4363 Litvínov - Záluží 1,
[c]VUAnCh-UNICV, Revoluční 84, 400 01 Ústí nad Labem

Ethylenová pyrolýza poskytuje širokou paletu produktů z nichž některé jsou na trhu velmi obtížně uplatnitelné a alternativou ke spalování může být jejich vracení zpět do pyrolýzy. Příkladem takové frakce může být na pyrolýzní jednotce v Chemopetrolu Litvínov a.s. tzv. zbytková frakce C9 (ZC9), tvořená převážně substituovanými aromatickými a vícenenasycenými polycyklickými uhlovodíky. Laboratorní pyrolýzou byly zkoumány možnosti jejího vyššího zhodnocení frakční destilací a/nebo její částečnou hydrogenací.

Surová ZC9 poskytuje velmi malé výtěžky lehkých olefinů. Významnými produkty jsou aromatické uhlovodíky C6-C8, které vznikají radikálovým odštěpováním substituentů v C9 alkylaromátech přítomných v surovině, 1,3-cyklopentadien vznikající štěpením dihydrodicyklopentadienu a pyrolýzní olej. Surovina je velmi stabilní a obtížně dosahuje vyšších konverzí.

Pro další studium byly připraveny destilační řezy ZC9, s cílem studovat separátní vlivy hlavních složek na výtěžky produktů. Níževroucí destilační řezy s vysokým obsahem aromátů produkovaly nejnižší množství lehkých olefinů. S rostoucím destilačním rozmezím řezu výtěžky ethylenu rostly až na hranici 10 hm. %.

Z hlediska produkce lehkých olefinů byla mnohem přínosnější variantou hydrogenace ZC9 frakce. Pro účely předběžného zhodnocení potenciálního přínosu hydrogenačních úprav byly v ZC9 selektivně hydrogenací nahydrogenovány konjugované dvojné vazby. Výtěžky lehkých olefinů se hydrogenační úpravou zvýšily na více než dvojnásobek, a vzrostly výtěžky lehkých kapalných produktů na úkor pyrolýzního oleje.

6P02

VPLYV KOVOV ALKALICKÝCH ZEMÍN NA VULKANIZÁCIU NENASÝTENÝCH KAUČUKOV A FYZIKÁLNO-MECHANICKÉ VLASTNOSTI VULKANIZÁTOV

Milan Olšovský[a], Peter Gášek[a], Jarmila Cingelová[a], Roman Brescher[b], Vendelín Macho[a]

[a] Fakulta priemyselných technológií TnUAD, Katedra chémie a technológie polymérov, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov, e-mail: olsovsky@fpt.tnuni.sk
[b] Vipotest, s. r. o., T. Vansovej 1054/45, 020 32 Púchov, e-mail: roman.brescher@vipotest.sk

V práci sa jednoznačne potvrdil kladný vplyv všetkých vybraných zlúčenín alkalických zemín na redukciu N-nitrózoamínov (NA) vznikajúcich počas vulkanizácie z urýchľovačov obsahujúcich štruktúrne jednotky sekun-dárnych amínov. Najlepší inhibítor NA zo sledovaných zlúčenín je oxid vápenatý u ktorého redukcia NA pri dávkovaní 0,5 dsk bola 65,5%. Optimálne dávkovanie tejto zlúčeniny do zmesí za účelom redukcie NA, vzhľadom na zachovanie požadovaných vlastností gumárenských zmesí je 0,3 dsk, kedy je redukcia NA 63%.

Zo sledovaných zlúčenín sa pozitívne ako inhibítory NA prejavili aj vápenaté a horečnaté soli karboxylových kyselín C_{16} - C_{22}. Redukcia NA bola u vápenatých mydiel 70% a u horečnatých mydiel 63%, pri dávkovaní 3,0 dsk. Pri tomto dávkovaní však dochádzalo už k výrazným zmenám spracovateľských i fyzikálno-mechanických vlastností vulkanizátu. Pri nižšom dávkovaní kedy nedochádzalo k výrazným zmenám vlastností bol však inhibičný účinok sledovaných solí nízky a pohyboval sa na úrovni 10 %.

Pri dávkovaní všetkých ingredientov v množstvách nad 0,3 dsk (či 0,5 dsk) dochádza k zmene spracovateľských a fyzikálno-mechanických vlastností. Sčasti sa spomaľuje vulkanizácia, predlžuje sa spracovateľská bezpečnosť a bezpečnosť Mooney, klesá modul 300 a zväčšuje sa obrusivosť, čo je možné kompenzovať zvýšením obsahu vulkanizačného činidla o 10%.

Z hľadiska vplyvu uvedených ingredientov na vulkanizáciu a fyzikálno-mechanické vlastnosti vulkanizátov, na ich zmenu najviac vplýval oxid a hydroxid vápenatý a to už pri malom dávkovaní. Dávkovanie sledovaných solí vápnika a horčíka v množstve (0,1 až 0,5 dsk) prakticky nevplývalo na priebeh vulkanizácie ani na fyzikálno-mechanické vlastnosti vulkanizátov. K zmenám dochádzalo až pri niekoľkonásobnom zvýšení dávkovania. Z hľadiska koeficientu rýchlosti vulkanizácie, ten sa prídavkom vápenatých a horečnatých solí nemenil ani pri dávkovaní 3,0 dsk. Zo sledovaných solí najmenej ovplyvňoval vlastnosti vulkanizátu uhličitan vápenatý.

Na potlačenie pórovitosti vplývali všetky pridávané zlúčeniny. Hlavne však vápenaté a horečnaté mydlá, ktoré výrazne ovplyvňovali veľkosť pórov. Počet pórov však výrazne zmenšoval aj oxid vápenatý. Všetky sledované zlúčeniny alkalických zemín sa veľmi dobre zamiešavali do zmesí a práve táto skutočnosť môže byť príčinou zníženia pórovitosti zmesí.

[1] Blume A., Giese U., Schuster R.H.: *Kautsch. Gummi Kunstst*., 49, 532, 1996.
[2] Rounbenler D.P., Patts R.S. [Thermo Electron Corp]: US patent 277 259 (1981).
[3] Židuljaková M., Olšovský M., Cingelová J., Macho V.: *Chemprogress 2004*, Púchov 2004.

6P03

FYZIKÁLNĚ CHEMICKÝ ZPŮSOB RECYKLACE ODPADNÍHO POLYETHYLENTEREFTALÁTU

Lukáš Anděl, Marcela Šafářová, Jaroslav Kusý

Výzkumný ústav pro hnědé uhlí, a.s., Budovatelů 2830, 434 37 Most
safarova@vuhu.cz; kusy@vuhu.cz; lpov@vuhu.cz;

Zvýšení podílu látkového i energetického využití odpadu je vzhledem k jeho současné nízké úrovni v ČR nutností. V západoevropských zemích dosahuje podíl recyklace odpadů 20-30%. V současné době se k široce používaných plastům řadí zejména PET (polyethylentereftalát), jehož vlastnosti ho předurčují mimo jiné k výrobě nápojových obalů. Opakované použití těchto obalů však nelze uskutečnit, neboť dosud nebyl technologicky vyřešen problém jejich sterilizace před dalším použitím. Tyto obaly jako nevratné končí většinou na skládkách nebo ve spalovnách. Recyklování PET je možno realizovat fyzikálními nebo chemickými postupy s různými odlišnostmi a problémy. Obtíže a nedostatky dosavadních postupů recyklace do značné míry zjednodušuje originální způsob fyzikálně-chemické recyklace odpadního PET, založený na působení mikrovlnného záření za vzniku suspenze kyseliny tereftalové, která se oddělí ze suspenze, promyje, vysuší a může sloužit opět jako surovina pro výrobu nového PET. Výhodou je, že se mohou zpracovávat také přítomné příměsi (PE a PP víčka, papírové etikety). Nový postup je velmi šetrný k životnímu prostředí, neboť se řadí mezi bezodpadové technologie. Zároveň umožňuje úsporu suroviny k výrobě PET, tj. kyseliny tereftalové, běžně připravované z p-xylenu, v podstatě tedy z ropy jako primární suroviny.

Práce vznikla v rámci řešení výzkumného záměru MSM 4456918101.

[1] Kusý J., Anděl L., Šafářová M., Valeš J., Přihláška vynálezu PV 2004-1056, 21.10.2004

6P04

VYUŽITÍ SIMULAČNÍCH PROGRAMŮ PŘI ANALÝZE CHEMICKÝCH PROCESŮ

Jaroslav Poživil, Vladimír Hanta

VŠCHT, Ústav počítačové a řídicí techniky, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika
e-mail jaroslav.pozivil@vscht.cz, vladimir.hanta@vscht.cz

Práce se zabývá simulací chemických kontinuálních procesů ve stacionárním stavu. V současné době jsou dostupné komfortní univerzální simulační programy, které osvobozují uživatele od rutinního programování a umožňují mu soustředit se na tvůrčí činnost. Simulační programy se neustále zdokonalují. Vývoj směřuje ke komplexním systémům umožňujícím vývoj nového procesu, jeho návrh (projekci), simulaci, ekonomické zhodnocení a řízení. I přes neustálé zdokonalování simulačních programů však zůstávají některé problémy s jejich využíváním stejné a je třeba jim věnovat pozornost, aby výsledky výpočtů byly hodnověrné a celá simulace byla ekonomicky efektivní. V práci jsou diskutovány některé problémy s analýzou topologie procesu a sestavením výpočetního schématu, s výběrem modelů aparátů, s popisem fyzikálně-chemických vlastností, se získáváním provozních a konstrukčních dat, s přizpůsobením modelu reálnému chování výrobny apod., které mohou způsobovat, že výsledky modelu neodpovídají skutečnému chování výrobního zařízení.

Jednou z oblastí, kde lze simulační výpočty výhodně používat, je plynárenství. Případová studie ukazuje vytvoření modelu úpravárenského závodu zemního plynu a simulaci možných změn zapojení existujícího procesu, které vedou k úspoře asi 70% nákladů na chlazení. Problematice simulace je věnována rozsáhlá literatura, např. [1], [2] a [3].

Tato práce byla vypracována za podpory programu č. MSM 6046137306 MŠMT ČR.

[1] Seider W. D., Seader J. D., Lewin Daniel R.: *Process Design Principles - Synthesis, Analysis, and Evaluation*, John Wiley, New York, 1999
[2] Smith R.: *Chemical Process Design*, McGraw-Hill, New York 1995
[3] Poživil J., Vaněk T., Bernauer B.: *Procesní systémové inženýrství*, Vydavatelství VŠCHT, Praha 1998

6P05

ALTERNATE ENERGY RESOURCES

Attila E. Pavlath

Western Regional Research Center, Albany, California, USA

The world's fossil energy resources are under attack by the increasing world population and its desire for more per capita energy use. Whether we have an optimist or pessimist outlook on how much time we have before we face a serious crisis, we are talking about less than a 100 years period. While conservation will help it gives only a short respite. It is evident that we must develop other energy resources, but which one and how? The lecture will describe wind, hydroelectric, geothermal, solar, and nuclear energy resources. What are the potential of these resources? The lecture will analyze the problems of developing them and the possible difficulties they can cause.

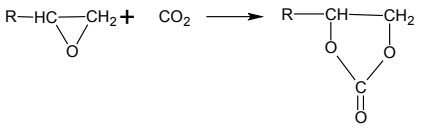
6P06

PRÍPRAVA CYKLICKÝCH ALKYLÉNKARBONÁTOV ZA MIERNYCH REAKČNÝCH PODMIENOK

Vendelín Macho[1], Milan Králik[2], Milan Olšovský[1], Jana Horniaková[3], Dušan Mravec[3]

[1] Fakulta priemyselných technológií TnUAD, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov
[2] VÚCHT, a. s., Nobelova 34, 836 03 Bratislava; e-mail: mkralik@vucht.sk
[3] Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava

Cyklické alkylénkarbonáty, resp. deriváty 1,3-dioxolán-2-ónov možno síce pripravovať mnohými syntézami [1, 3, 5], ale priemyselne sa využíva adícia oxidu uhličitého na alkylénoxidy (oxiran, alkyloxirány):



ΔH = - 96 kJ/mol

Nedostatkom je potreba vyššej reakčnej teploty (120 - 200 °C), dôsledkom čoho je aj potreba vysokého tlaku (4,3 - 15 MPa). Ako katalyzátory dominujú hlavne kvartérne halogenidy amónne, halogenidy i ftalocyanidy alkalických kovov, tiež hliníka, cínu, zinku, molybdénu a ďalších kovov [1 - 3, 5]. Vzhľadom na veľmi široké aplikačné možnosti cyklických alkylénkarbonátov, ako aj v našich podmienkach dostupné suroviny, pokúsili sme sa nájsť katalyzátor, či katalytický systém, ktorý by umožňoval pripravovať cyklické alkylénkarbonáty za podstatne miernejších reakčných podmienok. Väčšinu neraní sme uskutočnili s propylénoxidom, pričom dosiahnuté výsledky sme overili ešte v syntéze cyklických alkenylkarbonátov z oxidu uhličitého a týchto epoxyzlúčenín: etylénoxidu, 3,4-epoxybuténu, butylénoxidu, cyklopenténoxidu, cyklohexénoxidu a epichlórhydrínu. Na príklade propylénoxidu v diskontinuálnych pokusoch [15 g propylénoxid, 15 g N,N-demetylformamid - rozpúšťadlo, katalyzátor, počiatočný tlak CO_2 2 MPa, pri teplote (120 ≤ 1) °C v 3 h experimentoch] sme preskúmali vplyv potenciálnych katalyzátorov. Ako vhodné sa ukázali halogenidy kovov triády železa, ale tiež vápnika, zinku a cínu. Významný je vplyv aniónov anorganických kyselín solí týchto kovov. Mravčany, octany a sírany majú však sotva polovičnú aktivitu. Súvisí to s reakčným mechanizmom. Zreteľne menej aktívne sú však aj chloridy horčíka a sodíka. Tak v prípade $CoCl_2.6\ H_2O$ jeho optimálne množstvo počítané na propylénoxid bolo 1,95 % mol. a $FeCl_3.\ 6\ H_2O$ 2,06 % mol., pri konverzii propylénoxidu 99,80, resp. 99,99 % a pri selektivite na propylénkarbonát 93,3, resp. 77,1 %. Selektivita sa zvyšuje použitím bezvodých solí, ale aj použitím nižšieho tlaku CO_2. Jeho zvýšený tlak nad 3 MPa v prípade syntézy propylénkarbonátu a podobne aj iných cyklických karbonátov nielen že sa znižuje reakčná rýchlosť, ale hlavne selektivita na propylénkarbonát, resp. alkylénkarbonáty.

Prezentujú sa mnohé, vrátane nevyužitých možností využitia cyklických alkylénkarbonátov a okrem uvedených komponentov katalytického systému, sa odporúča uskutočňovať adíciu v aprotickom bázickom prostredí pri parciálnom tlaku CO_2 od 0,1 najviac do 3,5 MPa.

[1] Kowolik E. J., Fischer J. M.: US patent 2 764 469 (1956).
[2] Koreňkova O. P., Kvaša V. B.: Chim. Promyšl. 1961 (9), 625.
[3] Bobileva L. V., Kyrov S. J., Ilina G. V.: Neftechimija, 35, 209 (1996).
[4] Marguis E. T., Sanderson J. P. [Texaco Chemical Co.]: US patent 5 283 356 (1994).
[5] Kossev K., Koseva N., Trev K.: J. Mol. Catal. A.: Chem. 194, 29 (2003)

6P07

ROZVOJ ANORGANICKÝCH PIGMENTU

Antonín Mlčoch

České technologické centrum pro anorganické pigmenty a.s. ,Nábřeží Dr.E.Beneše 24, 751 62 Přerov, antonin.mlcoch@precheza

V ČR byly vyráběny železité pigmenty (od 1832), zinková běloby (od r. 1864), litopon a blancfix (od 1904), titanová běloba (od 1925), oxidy olova (od 1788) a ultramarin (1879).V současné době je v ČR vyráběna titanová běloba a železité pigmenty v Precheze a.s. Přerov.Tento obor patří mezi nejdynamičtěji se rozvíjející anorganické výroby v Čechách.

Byznys titanové běloby se neustále rozvíjí díky vynikajícím optickým a aplikačním vlastnostem,upřednostňující tuto netoxickou a světlostálou bělobu v řadě oborů jako jsou nátěrové hmoty, papír, plasty, vlákna a další.Světová spotřeba titanové běloby dosahuje 4,7 mil tun a trvale meziročně roste o 2,7 % díky vysokému nárůstu spotřeby zejména v Číně a Indii.Byznys je globalizován, pět největších světových výrobců představuje 70 % globální kapacit. Je dokumentován rozvoj výroby titanové běloby a železitých pigmentů ve světě a u nás.

Úspěch výroby anorganických pigmentů v Precheze byl podmíněn vyřešením zpracování vedlejších produktů ze sulfátové technologie na komerční produkty,výrazným rozšířením sortimentu a kvality vyráběných pigmentů ve spolupráci s VŠCHT Praha, Univerzitou Pardubice a VÚCHV Svit. Je komentován nárůst optické účinnosti, povětrnostní odolnosti vyráběných pigmentů,stejně jako energetické náročnosti a ekologické aspekty. Tento model je příkladem trvale udržitelného rozvoje chemie a úzké spolupráce průmyslu s vysokými školami a výzkumnými pracovišti[1]. S nimi je řešen i vývoj nano materiálů na bázi TiO_2 a Fe_2O_3, stejně jako High Performance Coloured Pigments.

[1] Karlubík R., Intertech konference Cannes 2005

6P08

OPTIMALIZACE PROCESU MOKRÉ GRANULACE VYUŽITÍM FUZZY LOGIKY

Lucie Břenková[a], Zdeněk Bělohlav[a], Petr Durdil[b], Jiří Hanika[c], Jana Kalčíková[a], Václav Tomášek[b]

[a]Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6
[b]Zentiva a.s. Praha, U Kabelovny 130, 102 37 Praha 10
[c]Ústav chemických procesů AV ČR, Rozvojová 135, 165 02 Praha 6
e-mail: lucie.brenkova@vscht.cz

Průběh procesu mokré granulace v míchaných granulátorech, při kterém se hnětením formují sférické a zhutněné granule, závisí např. na frekvenci otáček hlavního míchadla, teplotě granulované směsi, distribuci velikosti částic vstupních surovin a na množství přidávaného vlhčiva. Optimální ukončení procesu mokré granulace je možné detekovat monitorováním rostoucího příkonu motoru hlavního míchadla granulátoru.

Práce se zabývá matematickým modelováním procesu mokré granulace léčiv využitím fuzzy logiky. Pro návrh a optimalizaci modelů byla použita experimentální data, naměřená v provozních a poloprovozních granulátorech akciové společnosti Zentiva. S cílem zdokonalit řízení procesu mokré granulace léčiv a v souladu s požadavky výrobní praxe byly navrženy dva fuzzy modely, které umožňují na základě dostupných fyzikálních vlastností vstupních surovin předpovídat přibližné hodnoty parametrů procesu mokré granulace léčiv. Vstupní veličiny charakterizují tvar a distribuci velikosti částic účinné látky, výstupy modelů tvoří množství přidané vody potřebné k optimálnímu zvlhčení směsi a hodnoty příkonu motoru hlavního míchadla v okamžiku dosažení požadovaného stupně granulace směsi. Praktickými výstupy modelování jsou nomogramy, podle kterých lze optimalizovat množství přidávané vody a zároveň predikovat hodnotu příkonu hlavního míchadla při dosažení optimálního stavu granulované směsi. Matematické modely tak mohou přispět k zlepšení kvality vyráběných granulátů, především v případě častých změn výrobců účinné látky.

Tato práce je podporována grantem VŠCHT č. 111 08 0015.

[1] Břenková L.: *Diplomová práce.* VŠCHT Praha, Praha 2004.
[1] Bělohlav Z., Břenková L., Durdil P., Hanika J., Lehocký A., Řápek P., Tomášek V.: Chem. Listy 98, 1146 (2004).
[1] Jura P.: *Základy fuzzy logiky pro řízení a modelování.* Vutium, Brno 2003.

6P09

VPLYV MODIFIKÁCIE GUMOVEJ DRVINY AKO POTENCIÁLNEHO PLNIVA GUMÁRSKYCH ZMESÍ

B. Cíbik[1] ,Vendelín Macho[1], A. Hanzlíková[1]

[1]Fakulta priemyselných technológií so sídlom v Púchove, TnU AD v Trenčíne, T. Vansovej 1054/45, 02032 Púchov, e-mail: cibik@fpt.tnuni.sk

Súčasne s rozvojom gumárskeho priemyslu sa objavil aj problém využitia vulkanizovaného odpadu a opotrebovaných gumárskych výrobkov. Recyklácia je rozsiahle opätovné navrátenie odpadových látok do obehu a opätovné využívanie energie a tepla. Jednou z možností recyklácie je použitie gumárskeho odpadu vo forme gumovej drviny.

Výsledkom štúdia vplyvu gumovej drviny na fyzikálno-mechanické vlastnosti gumárskych zmesí a vulkanizátov sú tieto modelové predstavy [1]:

a) Zosietené častice mletej gumy nepôsobia v kaučukovej, resp. gumárskej zmesi pri miešaní ani ako aktívne alebo neaktívne plnivo, ani ako polymér, ale v ideálnom prípade dokonalého zmáčania ako partner v zmesi rôznych elastomérnych materiálov.

b) V nevulkanizovanom stave zmesi predstavujú tieto častice zosieťovanú disperznú fázu. Počas spracovania (laminárny tok) sa nepodieľajú na deformačných procesoch a ovplyvňujú tým spracovateľské vlastnosti zmesí (viskozita, pružnosť) a tiež kvalitu povrchu.

c) V zosieťovanom materiáli sú výsledné vlastnosti určené vlastnosťami zložiek (gumovej drviny a matrice) a ich vzájomnými väzbovými silami. Pri ideálnych väzbových silách a rovnakých zložkách by teoreticky nemali byť žiadne rozdiely medzi plnenými a neplnenými materiálmi. V takom prípade by mali výsledné vlastnosti zmesi zodpovedať vzájomným pomerom fáz a ležať medzi vlastnosťami oboch zložiek.

V práci sa vychádzalo zo skutočnosti, že gumová drviny pridávaná do kaučukových, resp. gumárskych zmesí spôsobuje zhoršenie fyzikálno-mechanických vlastností. Pridávaná gumová drvina sa správa v daných kaučukových, resp. gumárskych zmesiach ako neaktívne plnivo. Práca je zameraná na možnosti aktivácie gumovej drviny. Gumová drvina sa aktivovala fyzikálno-chemickou modifikáciou (povrchová modifikácia) a chemickou modifikáciou. Pritom sa porovnával vplyv daných modifikácií na aktivitný koeficient α_F charakterizujúci aktivitu plniva v zmesi.

[1] Röthemeyer F.: Plasty a kaučuk, 30, 12, 363-366 (1993).

6P10

HYDROGENACE STYRENU V PILOTNÍM ZKRÁPĚNÉM REAKTORU

Martina Šimíčková[a], Vratislav Tukač[a], Václav Chyba[a], Jaromír Lederer[b], Jiří Kolena[b], Josef. Šimek[b], Jiří Hanika[c]

[a] Ústav organické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, ČR, martina.simickova@vscht.cz
[b] Unipetrol, a.s., VUANCH, 436 70 Litvínov, ČR, jaromír.lederer@vuanch.cz
[c] Ústav chemických procesů, Akademie věd České republiky, 165 02 Praha 6, ČR, hanika@icpf.cas.cz

Reaktory se zkrápěným ložem katalyzátoru se v chemickém průmyslu používají především pro rafinační hydrogenace, hydrokrakování nebo oxidace. V těchto reaktorech stékají plynná a kapalná fáze souproudně přes pevné lože částic katalyzátoru. Výhodou těchto reaktorů je jednoduchá konstrukce, velká zpracovatelská kapacita a možnost provozování i za vysokých tlaků a teplot. Nevýhodou je závislost jejich výkonu na hydrodynamice a transportních jevech.

Jedním z procesů, který je realizován ve zkrápěném reaktoru, je selektivní hydrogenace dienů a některých olefinů přítomných v pyrolyzním benzínu na paládiovém katalyzátoru. Pyrolýzní benzín je jedním z vedlejších produktů tepelného rozkladu těžších ropných frakcí, pyrolýzy na ethylen a propylen. Pyrolýzní benzín obsahuje C_5 - C_{12} uhlovodíky, se značnou koncentrací polymerizujících dienů a olefinů jako prekurzorů tvorby uhlíkatých úsad při dalším zpracování, např. izolaci aromátů. Proto je tedy nezbytně nutné tyto dieny selektivně hydrogenovat. Hydrogenace se obvykle provádí na palladiových katalyzátorech s aktivní složkou soustředěnou v povrchové vrstvičce. Reakce je značně tepelně zabarvená, stav reaktoru je blízký adiabatickým podmínkám, a jeho výkon a selektivita jsou ovlivněny transportními jevy.

Cílem této práce bylo vyhodnocení parametrické citlivosti modelové hydrogenace styrenu v zkrápěném reaktoru pilotního měřítka za různých reakčních podmínek. Součástí byla také volba a ověření vhodnosti kritérií pro interpretaci výsledku a přenos měřítka jako vhodného nástroje pro odhad výkonu reaktoru.

Projekt byl řešen za dílčí podpory grantu MPO-FT-TA/039, Ministerstva průmyslu a obchodu ČR a MSM 604 6137301, Ministerstva školství, mládeže a sportu ČR.

6P11

VÝVOJ A VZÁJEMNÁ KONKURENCE AUTOMOBILOVÉHO BENZÍNU A MOTOROVÉ NAFTY JAKO ROZHODUJÍCÍCH PALIV PRO AUTOMOBILY

Hugo Kittel, Josef Sváta

Česká rafinérská a.s., O.Wichterleho 809, 278 52 Kralupy nad Vltavou, info@crc.cz

Automobilový benzín (BA) a motorová nafta (NM) vyráběná z ropy představují v celé historii automobilismu rozhodující paliva používané pro pohon automobilů. V současnosti se podílejí se na spotřebě více jak 95%. Při stejným výchozích ekonomických podmínkách (daně) stále nemají konkurenci.

V průběhu posledních 30 let se zásadním způsobem změnily zejména:

- Spotřeba motorových paliv - významný vzrůst, spotřeba NM rostla rychleji, než BA.
- Kvalitativní požadavky na motorová paliva - ukončení výroby BA obsahujících olovo, pokles obsahu síry z 0,2% hm na 10 ppm hm, aromátů v BA a nejnověji v NM a vzrůst průměrného oktanového číslo BA.
- Technologie používané k výrobě motorových paliv - zásadní změněny chemicko- inženýrské řešení osvědčených procesů, např. katalytického reformování, alkylace, izomerace C5/C6 uhlovodíků, syntézy éterů, selektivního odsíření frakcí FCC benzínu. a ve vývoji různých typů katalyzátorů pro výrobu paliv.
- Formulace paliv - využívání nových komponent, jako například MTBE, biokomponent a nových aditiv pro dosažení požadované kvality.
- Relace palivo & spalovací motor - náhrada karburátoru elektronickým vstřikováním paliva v zážehovém motoru, masové využívání vznětového motoru v osobních a malých užitkových automobilech.
- Relace palivo & životní prostředí - je vyjádřena např. přítomností katalyzátoru ve všech moderních vozidlech a řadou elektronických čidel; jejich využití je podmíněno přísnými požadavky na kvalitu motorového paliva. Přímý vliv relace na použití komponent pro výrobu motorových paliv - zákaz MTBE v USA, rozšíření alkylátu nebo implementace biokomponent.

Bude autobenzín v blízké budoucnosti tvořit je okrajový produkt rafinérií? Dle názoru autorů příspěvku nikoliv. Na nabídku obou motorových paliv budou působit marketingové vlivy (vývoj nabídky a poptávky, módnost), vyrovnání spotřební daně zdraží NM, se snižující se spotřebou nových motorů obecně se sníží rozdíly ve spotřebě zážehových a vznětových motorů. BA je možné velmi dobře „vyladit“ z hlediska požadovaných vlastností a v budoucnosti může být formulován z individuálních uhlovodíků - např. isooktanu, ETBE, xylénů. Benzínové uhlovodíky nabízejí snazší využití v alternativních pohonech motorových vozidel.

6P12

ŠTRUKTÚRA A VLASTNOSTI BYTOVÝCH TEXTÍLIÍ ZO ZMESI NOVÝCH TYPOV VLÁKIEN

Sýkorová J.[a], Jambrich M.[a], Murárová A.[b], Hajduchová Ľ.[a], Šiarnik M.[c]

[a)]Fakulta priemyselných technológií, TnU AD, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov, Slovensko j.sykorova@zoznam.sk
[b)]Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovensko, anna.murarova@stuba.sk
[c)]Quiltex a.s., Garbiarska 678, 031 01 Liptovský Mikuláš, Slovensko miso@quiltex.sk

Príspevok je zameraný na aplikáciu hydrofóbnych a hydrofilných syntetických vlákien v bytových textíliách, ktoré patria k dôležitej súčasti života. Podľa technológie výroby ich zaraďujeme do skupiny netkaných textílií. Pre ich prípravu sa väčšinou používajú PES vlákna, ktoré sú silikonizované. Vo všeobecnosti sú tieto vlákna hydrofóbne a vplyvom času a fyziologických podmienok, ktoré vznikajú napr. pri používaní vankúšov spotrebiteľom, dochádza k agregácií vlákien a k zhoršovaniu ich úžitkových vlastnosti.

Preto sme hľadali vlákno, ktoré by bolo hydrofilné (príjmom vlhkosti by napomohlo k zníženiu agregácie PES vlákien) s deformačnou krivkou blízkou syntetickým vláknam. Týmto podmienkam najlepšie vyhovovali celulózové vlákna. Zamerali sme sa na vlákna z regenerovanej celulózy - lyocellové vlákna, ktoré sú vyrobené EKO postupom (bezsírouhlíkovým).

Pre prípravu výplní do vankúšov sme teda použili polyesterové a lyocellové strižové vlákna so zmenenou priečnou a pozdĺžnou geometriou a sledovali sme vplyv zmesovania týchto vlákien na fyzikalno-mechanické a úžitkové vlastnosti vankúšov. Z vlákien sa pripravili agregované vlákené útvary-vločky pri rôznych časoch spracovania vlákien (0, 2, 4, 6, 8min) a materiálového zloženia 100% PES, 50 % Lyocell / 50% PES, 100% Lyocell. Na uvedených vzorkách sme zisťovali ako vplýva čas prípravy na veľkosť agregovaných vlákenných útvarov, ich makromorfológiu, mernú hmotnosť, zotavovacie vlastnosti. Zaujímavé je aj hodnotenie úžitkových vlastností pomocou probantov pri praktickom skúšaní vankúšov.

6P13

MULTIPRODUCT BATCH PROCESSES AS DISCRETE EVENT SYSTEMS

Vladimír Hanta, Jaroslav Poživil

ICHT, Department of Computing and Control Engineering, Technická 5, 166 28 Prague 6, Czech Republic, e-mail: hantav@vscht.cz, pozivilj@vscht.cz

Batch mode of production belongs among traditional production methods of chemical, pharmaceutical and food industry products. Its characteristic feature is flexible utilization of diverse sources (raw materials, apparatuses, power, manpower etc.) for manufacturing less amounts of greater number of different products. Batch production processes can be operated in two different modes as multipurpose or multiproduct ones. For multiproduct batch processes is typical that several different products are manufactured in sequence by similar technologies on the same production line.

Basic methods for management of multiproduct batch processes are scheduling, short- and medium-term planning. To describe batch processes for planning needs, time parameters of manufacturing operations or capacity parameters of production apparatuses or storage and transport means. It is useful to model batch processes as discrete event systems. Every discrete event (operation, apparatus cleaning, apparatus breakdown, etc.) can be described by means of these data:

- conditions that have to be met for arising of the event,
- duration of the event,
- conditions that will be changed by completion of the discrete event.

Discrete models of multiproduct batch processes can be used with advantages for design, verification and optimization of production plans and for identification and elimination of production line bottlenecks.

The work has been supported by the fund No MSM 6046137306 of Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic. This support is very gratefully acknowledged.

[1] Hanta V.: *Modelling and Simulation of Multiproduct Batch Processes as Discrete Event Systems*. In: Proc. of 38th Int. Conf. on Modelling and Simulation of Systems MOSIS '04, 281-288, (2004)

[2] Robinson S.: *Successful Simulation. A Practical Approach to Simulation Projects.* McGraw-Hill, London (1994)

6P14

VÝZKUM A VÝROBA SYNTHETICKÝCH VONNÝCH LÁTEK V ČR

Libor Červený

Ústav organické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická, Praha Technická 5, 16628 Praha 6, libor.cerveny@vscht.cz

Z výroby vonných a chuťových látek se stalo významné průmyslové odvětví, v němž hraje rozhodující roli několik nadnárodních společností, ovšem i malé firmy, mající mnohaletou tradici, mohou nalézt své místo na slunci, dokáží-li uplatnit svoje specifické výhody. Dokladem toho je postavení podniku Aroma Praha, a.s., největšího tuzemského výrobce, který intenzivní spoluprací s Ústavem organické technologie VŠCHT Praha, trvající již 35 let, změnil významně své výrobní portfolio a stal se významným producentem vonných látek evropského formátu.

Spolupráce Ústavu organické technologie VŠCHT Praha s podnikem Aroma začala v roce 1970 řešením v tu dobu aktuálních problémů s čistotou benzyl-acetátu. Zpočátku se odehrávala v rovině odborné pomoci, až postupně přerostla v systematickou vědecko-výzkumnou činnost, zaměřenou jak do oblasti základního výzkumu, tak postupně i do oblasti tzv. tvůrčí realizační činnosti, vrcholící zaváděním nových procesů výroby tradičních i zcela nových vonných látek. Vznikaly původní vědecké práce, kterých je dnes více než osm desítek a spolu asi s padesáti autorskými osvědčeními zachycují dosažené výsledky. Průlom do výrobního sortimentu Aromy přinesla výstavba hydrogenační jednotky, jejímž základem jsou autoklávy o objemu 300 a 500 l. Tento fakt nebyl náhodný, ale vyplýval z vědeckého zaměření ÚOT a z faktu skutečně velmi široké využitelnosti hydrogenačních procesů v oblasti syntézy vonných a chuťových látek. Jako první látka začal být vyráběn tzv. hydroskořicový alkohol, 3-fenylpropan-1-ol. Brzy našel široké využití v parfémových kompozicích a stal se i výhodným exportním artiklem. Následovala celá řada dalších, na VŠCHT vyvinutých a v Aromě postupně vyráběných látek. Dnešní výroba komerčně nejúspěšnějšího Arocetu (2.-terc-butyl-cyklohexylacetát) představuje třetinu celosvětové produkce a pohybuje se kolem 1000 t ročně.

V práci je ukázán přehled propracovaných syntéz, z nichž řada byla realizována v technické praxi. Většina z nich je založena na katalytické hydrogenaci, kterou jako proces nabízí a.s. Aroma i v rámci tzv. „custom synthesis“.

Spolupráce Ústavu organické technologie VŠCHT v Praze s podnikem Aroma je příkladem oboustranně výhodné dlouhodobé systematické spolupráce akademického pracoviště s průmyslovým podnikem. Řada laboratorních výsledků nalezla uplatnění v průmyslové praxi, především proto, že výzkum byl takto cíleně orientován. Vedle toho byl vždy hledán a nacházen též prostor pro badatelskou činnost. Do výzkumu byli bohatou měrou zapojeni studenti oboru Technologie organických látek, z nichž mnozí zůstali věrni nejen vystudovanému oboru, ale našli své uplatnění přímo ve výzkumu, vývoji nebo výrobě syntetických vonných a chuťových látek.

6P15

LABORATORNÍ PYROLÝZA NAFTENICKÝCH UHLOVODÍKŮ

Lucie Starkbaumová[a], Petr Zámostný[a], Zdeněk Bělohlav[a]

[a]VŠCHT Praha, ÚOT, Technická 5, 166 28 Praha 6, e-mail: lucie.starkbaumova@vscht.cz

Tato práce byla zaměřena na použití laboratorní pyrolýzní plynové chromatografie ke studiu chování naftenických a hydroaromatických uhlovodíků a vysvětlení odlišností v jejich chování na úrovni jednotlivých uhlovodíků i jejich skupin.

Laboratorní experimenty byly koncipovány tak, aby umožnily sledovat závislost reaktivity a selektivity štěpení na velikosti cyklu, počtu a délce substituentů a přítomnosti dvojné vazby či aromatického jádra v molekule uhlovodíku. Byly prováděny nejen při standardních podmínkách, ale i při nižších teplotách, aby dosažením nízkých hodnot konverze bylo možné diskutovat mechanismus primárního štěpení.

Porovnáním selektivity vybraných produktů bylo možné sledovat rozdílné chování nesubstituovaných cykloalkanů v porovnání se substituovanými. Vliv na skladbu produktů měla dále poloha více stejných substituentů v cyklu a také přítomnost dvojné vazby a aromatického jádra v molekule uhlovodíku způsobila odlišné chování při štěpení.

Pro testované látky byly navrženy mechanismy štěpení, které vysvětlují vznik všech pozorovaných produktů nízkoteplotních experimentů. Mechanismy zahrnovaly převážně β-štěpení vazeb C-C a izomerace radikálů mezi polohami 1 a 5. V menší míře se uplatnily i molekulové reakce, β-štěpení vazeb C-H a adice radikálů na dvojnou vazbu.

Reaktivita vyjádřená jako závislost dosažené konverze výchozí látky na teplotě štěpení rostla u cykloalkanů s rostoucí délkou alkylového řetězce, reaktivita nenasycených cyklických uhlovodíků byla vyšší než reaktivita odpovídajících nasycených homologů a reaktivita hydroaromátů vůči aromátům rostla s počtem nasycených vazeb.

6P16

NEADITÍVNE VYSOKÝ ÚČINOK VEĽMI MALÝCH MNOŽSTIEV POLYETYLÉNOXIDU S MOLEKULOVOU HMOTNOSŤOU 600 000 NA PRIEDUŠNOSTI A ZMENA ĎALŠÍCH TECHNOLOGICKÝCH VLASTNOSTÍ ZLIEVÁRENSKÝCH ÍLOVÝCH FORMOVACÍCH ZMESÍ

Harold Mäsiar, Nikola Kaloforov

Trenčianska univerzita Alexandra Dubčeka v Trenčíne, Fakulta špeciálnej techniky Študentská 1, 911 50 Trenčín, e-mail: masiar@tnuni.sk

Veľmi malé množstvá polyetylénoxidu s molekulovou hmotnosťou 600 000 (PEO 600 000) majú neaditívny účinok na zvýšenie priedušnosti a to väčší pri vyšších energiách zhustenia (18,62 J). Zvýšenie priedušnosti je overené nami pri takých malých množstvách PEO 600 000 ako 0,0365 % -hm., 0,073 % -hm. a 0,1 % -hm. Tento účinok je ohraničený pri väčšom obsahu PEO ako 0,1 % -hm. tým, že v názve uvedenej zmesi je zdanlivo suchšia, čo negatívne ovplyvňuje jej formovateľnosť. Táto zmes je použiteľná len v užšom intervale relatívnej vlhkosti. Tiež pri väčšom obsahu PEO ako 0,1 % -hm. ale aj vyššej relatívnej vlhkosti, PEO začína mať zahusťovací účinok.

Väznosť sa mierne zvyšuje pri účinku vyššie uvedených veľmi malých množstiev PEO. Dobré výsledky sa dosahovali pri 0,0365 % -hm. do 0,05 % -hm.

Zlepšená drobivosť najmä pri vyšších energiách zhustenia (18,62 J) pravdepodobne je preto, že PEO pôsobí na znižovanie trenia vzduchu počas filtrácie v názve uvedenej zmesi.

Pevnosť v kondenzačnej zóne sa do 1 % -hm. PEO mení podobne ako väznosť vyžíhanej zmesi, avšak je výnimka pri 0,05 % -hm. PEO nevyžíhanej zmesi.

Adsorbcia metylénovej modry vyžíhanej zmesi má

pomerne vyrovnaný priebeh. Tento fakt možno vysvetliť s tým, že teplota spaľovania PEO je podstatne nižšia ako teplota, pri ktorej zaniká aktívnosť bentonitov.

Na základe získaných experimentálnych výsledkov predpokladáme, že účinok PEO na uvedených v názve formovacích zmesí nájde aplikáciu pri odlievaní kovov s nižšími teplotami tavenia, kde sa vyžaduje vysoká priedušnosť zmesi alebo do jadrových živicových zmesí.

6P17

PŘÍPRAVA Pd/Al_2O_3 KATALYZÁTORŮ MIKROEMULZNÍ TECHNIKOU

Jan Patera[a], Jiří Krupka[a], Květa Jirátová[b]

[a]Ústav organické technologie, Fakulta chemické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6
[b]Ústav chemických procesů AV ČR, Rozvojová 135, 165 02 Praha 6
Jan.Patera@vscht.cz

Jedním z aktuálních témat heterogenní katalýzy je příprava katalyzátorů s přesně definovanou nanostrukturou aktivních složek a výzkum jejich chování v katalytickém cyklu.

Cílem této práce je příprava nosičových katalyzátorů s velikostí částic palladia 2-10 nm a s velmi úzkou distribucí velikosti těchto částic. Podle dostupné literatury lze metodou reverzní mikroemulze připravit katalyzátory s velikostí částic palladia až 2 nm. Mikroemulzní systém tvoří vodný roztok chloridu palladnatého, vhodný surfaktant a organické rozpouštědlo. V naší práci je pro přípravu Pd katalyzátoru na gama-alumině použit komerční tenzid s označením IGEPAL CO-520 rozpuštěný v cyklohexanu. Výsledná velikost částic palladia je výrazně ovlivňována podmínkami při přípravě mikroemulze a může být řízena změnou velikosti micel, koncentrací $PdCl_2$ ve vodném roztoku a způsobem redukce.

Předmětem příspěvku je diskuze vlivu koncentrace roztoku $PdCl_2$, resp. obsahu vodné fáze v mikroemulzi při zachování výsledného obsahu Pd na nosiči, na efektivitu přípravy a na výslednou velikost Pd částic. Rovněž bude diskutována možnost redukce palladia a preimpregnace nosiče alkáliemi jako další modifikace přípravy těchto katalyzátorů.

Tato práce vznikla s finanční podporou vnitřního grantu VŠCHT „Vliv velikosti částic aktivní složky Pd katalyzátorů na selektivitu hydrogenace nitrilů“ uděleného v roce 2005.

6P18

POLYMERY JAKO NOSIČE IDENTIFIKAČNÍCH TĚLÍSEK

Miroslav Večeřa, Luboš Prokůpek, Ladislav Svoboda

Univerzita Pardubice, FCHT, nám. Čs. Legií 565, 532 10 Pardubice, Miroslav.Vecera@upce.cz

Od sedmdesátých let minulého století začalo ve světě docházet k nárůstu teroristických aktivit, často za použití různých výbušin. Objevil se tedy požadavek na větší kontrolu výbušin a na nalezení způsobu, jakým by bylo možno výbušiny identifikovat jednak před jejich zneužitím, jednak po zneužití, především určit původ výbušiny, výrobce, dobu výroby, komu byla prodána nebo do čí rukou se mohla dostat. Tyto informace by vedly ke značnému usnadnění práce policie při pátrání po původcích pumových útoků. Otázka odhalení původu výbušin se nedávno dostala opět do popředí, zvláště po nové vlně terorismu, která zasáhla civilizovaný svět.

Tato práce se zaměřuje na výběr a zhodnocení nejvhodnějších polymerních materiálů pro přípravu tělísek pro povýbuchovou identifikaci výbušin. Jedná se o částečky přidávané v malém množství - 0,025 - 0,05 hmot. % k výbušné směsi, které v sobě nesou určitým způsobem zapsaný kód obsahující informace o výrobci a datu výroby výbušiny.

V současné době jedinou zemí, kde je uzákoněna povinnost výrobců značkovat výbušiny pomocí tělísek je Švýcarsko. Lze očekávat, že povinnost značkovat výbušiny se velmi brzy rozšíří po celé Evropské unii i v dalších státech.

Značkování lze rozdělit na značkování předvýbuchové a povýbuchové. Předvýbuchové značení má za úkol umožnit snadné odhalení trhaviny přidáním tělísek kontrastní látky. Povýbuchové značení má za cíl usnadnit identifikaci trhaviny po výbuchu. Identifikační tělíska (IT) jsou miniaturní částečky o rozměrech řádově ve stovkách mikrometrů, které v sobě obsahují informaci umožňující zjistit výrobce výbušiny a vypátrat až jejího posledního legálního vlastníka. Tělíska musí mít takové vlastnosti, aby byla schopna vydržet, relativně nepoškozená, podmínky výbuchu. IT jsou v podstatě směsi polymerního nosiče a tuhých práškových plniv a aditiv, která zajišťují funkci. Tělísko je buď ve formě homogenního celku nebo se skládá z více vrstev.

Jednou z prvních metod vytvoření určitého kódu bylo využití různých kovů ve formě oxidů, které byly smíchány s polymerní matricí. Tou byly např. termoplastické polymery, epoxidové, či melaminové pryskyřice. V praxi se v současnosti využívá tělísek Microttagant, vyvinutých ve společnosti 3M a vyráběných společností Microtrace. Informace o původu výbušiny je zde zakódována pomocí až devíti různobarevných vrstev pigmentů. Každá barva má přiřazeno své číslo. Jako pojivo se používá alkydmelaminová pryskyřice. Tělíska se však často „rozloupnou“ a kód je pak přerušen. V této práci byly jako tepelně odolné a vhodné polymery pro IT použity polyorganosiloxany, některé typy epoxidových pryskyřic a sírou vulkanizované polybutadieny. Další částí práce bylo zvolit vhodnou technologii pro zapracování tělísek do plastické trhaviny.

6P19

POUŽITÍ NAFIONOVÉ MEMBRÁNY MODIFIKOVANÉ VODIVÝMI POLYMERY V PALIVOVÉM ČLÁNKU TYPU PEM

Martin Paidar, Sabina Moravcová, Karel Bouzek

Ústav anorganické technologie, Fakulta chemické technologie, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6,ČR, e-mail: paidarm@vscht.cz

Palivové články typu PEM jsou považovány za perspektivní zdroj elektrické energie. Jejich širokému rozšíření však v současnosti brání řada nedostatků, které je nutno dořešit. Mezi hlavní nedostatky patří nízký stupeň využití katalyzátoru a pronikání paliva skrz membránu. Použití vodivých polymerů představuje možné řešení těchto problémů. Vodivé polymery vykazují souběžně elektrickou i iontovou vodivost. Proto lze očekávat vyšší stupeň využití naneseného katalyzátoru než je tomu u současných komerčních materiálů. Zároveň jsou mnohem méně propustné pro palivo, takže nanesení tenké vrstvy na membránu výrazně omezí pronikání paliva z prostoru anody ke katodě.

Pomocí difúzní metody[1] byla nanesena na povrch membrány Nafion 117 vrstva polypyrrolu (PPy) nebo polyanilínu (Pani). Takto modifikovaná membrána byla následně testována v kyslíko/vodíkovém palivovém článku (FC). Jako elektrody byly použity komerčně dodávané plynové difúzní elektrody ELAT (Pt ~ 5g/m^2, Nafion covered 6-8g/m^2). Jak bylo zjištěno přítomnost PPy nebo Pani negativně ovlivňuje vodní režim článku. Nejvyššího výkonu FC bylo dosaženo v případě vrstvy PPy nanesené na membráně na straně katody, ten se však s časem snižoval. V případě použití PPy vrstvy na straně anody dosažený výkon FC byl cca 10 krát nižší, ale vykazoval časovou nezávislost. V případě použití Pani byly dosažené výkony ve srovnání s PPy nižší, ale vykazovaly vetší časovou stálost.

Tato práce vznikla s podporou grantu GAČR 104/05/P563.

[1] S. Moravcová, Z. Cílová, K. Bouzek, *J. Appl. Electrochem.*, v tisku.

6P20

APPLIED RESEARCH IN THE INSTITUTE OF CHEMICAL PROCESS FUNDAMENTALS, ACADEMY OF SCIENCES OF THE CZECH REPUBLIC (ASCR), PRAGUE

Jiří Hanika

Ústav chemických procesů AV ČR, Rozvojova 135, CZ 165 02 Prague 6 - Suchdol
hanika@icpf.cas.cz

The Institute of Chemical Process Fundamentals (ICPF) is one of six institutes constituting the Section of Chemical Sciences of the Academy of Sciences of the Czech Republic. The ICPF [original Czech name: „Ústav teoretických základů chemické techniky“ - ÚTZCHT] was founded in 1960 from two well-established research groups (of the Czechoslovak Academy of Sciences), both already having long tradition. It was the Department of Organic Technology of the Chemical Institute headed by Professor Vladimír Bažant and the Laboratory of Chemical Engineering headed by Professor George Standart. The former introduced the research experience in the field of organosilicon compounds and heterogeneous catalysis, the latter continued research on distillation and extraction. In 1964, a group from the Institute of Physical Chemistry dealing with thermodynamics and phase equilibria joined the new Institute. The founder of the Institute and its first director was till his death in 1973 Professor Vladimír Bažant. The second personality who certainly gained recognition for creating the image of the Institute was Professor Eduard Hála.

In 1964 the Institute moved to a new campus located on the northwest outskirts of Prague (on the border between the suburban districts of Suchdol and Lysolaje). The new premises had permitted growth of the staff, which in the late sixties reached the number of 330. Also, new research programs in chemical engineering and chemical technology were initiated such as those on reactor engineering, homogeneous catalysis, non-Newtonian fluids, sublimation, separation processes, dynamics and control of chemical systems, and others. Most of these new programs have emerged as a result of research and development of complete technology for the production of terephthalic acid and polyesters.

Since 1989 some reorganizations took place resulting in substantial staff reduction. Recent figures of employees represent 122 researchers, 22 technicians, 18 administrative and 15 services staff. The Czech name of the Institute was also changed for a more concise one („Ústav chemických procesů“ - ÚCHP). The ICPF budget in 2004 consisted of institutional support from national budget (65%), research funds from national and foreign grant agencies (30%) and contracts with industry (5%).

The Institute of Chemical Process Fundamentals ASCR serves as a centre for fundamental research in chemical, biochemical, catalytic and environmental engineering. Besides these activities, the Institute acts as a graduate centre for PhD studies in the field of chemical engineering, industrial chemistry, physical chemistry, organic chemistry and biotechnology. More information about ICPF is available on the website www.icpf.cas.cz.

6P21

THE APPLICATION OF FTIR SPECTROSCPY ON CHARACTERIZATION OF PAPER SAMPLES, MODIFIED BY BOOKKEEPER PROCESS

Martin Polovka[a], Júlia Pigošová[b], Katarína Vizárová[a], Soňa Kirschnerová[a], Lenka Bieliková[a], Milan Vrška[a]

[a]Department of Chemical Technology of Wood, Pulp and Paper, bDepartment of Physical Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava, Slovak Republic.
e-mail: martin.polovka@stuba.sk

Paper and other lignocellulosic materials undergo the destruction as a result of ageing, influenced by various factors [1, 2] and accelerated by the formation of acids from components, used during its production. Various deacidification processes were developed in an order to prevent or eliminate acidic destruction. Bookkeeper, based on MgO dispersion in perfluoroheptane, is the widely used one [3].

In present work, the effect of its application is studied by means of FTIR DRIFT technique in an order to fill up the lack and the certain contradiction of information about its action on real paper samples. The spectral changes in Bookkeeper modified samples comparing to reference (unmodified sample), along with the influence of various ageing conditions (temperature 23.3, 35, 80 °C at relative humidity 81 and 98%) were investigated.

The application of Bookkeeper reagent causes significant changes mostly in the region of 3700 cm^{-1}, assigned to the coordination of stretching vibrations of OH groups coordinated with Mg^{2+} ions; 3000/1600 cm^{-1} - valence vibrations of OH groups of water and hydrogen bond structures; in the region 1740-1720 and 1630-1650 cm^{-1} indicating the changes in carbonyl/carboxylate content, which also influences the relative humidity and the rise of temperature, accelerating the transformation of carbonyls to carboxylates.

[1] Katuščák, S., *Wood Res.* 45, 1 (2000).
[2] Valko, L., Klein, E., Kovařík, P., Bleha, T., Šimon, P., *Eur. Polym. J.*, 37, 1123 (2001).
[3] Buchanan, S. et al.: An Evaluation of the Bookkeeper Mass Deacidification Process: Technical Evaluation Team Report for the Preservation Directorate, Library of Congress. Preservation Directorate, Library of Congress. Pittsburgh, PA (1994).

6P22

NĚKTERÉ ASPEKTY ANALÝZY TĚKAVÝCH HALOGENOVANÝCH ORGANICKÝCH LÁTEK VE VODĚ

P. Kuráň[1], J. Burdová[2], P. Janoš[3]

[1] Výzkumný ústav anorganické chemie, a. s., Revoluční 84, 400 01, Ústí nad Labem, e-mail: pavel.kuran@vuanch.cz
[2] Výzkumný ústav anorganické chemie, a. s., Revoluční 84, 400 01 Ústí nad Labem, e-mail: jana.burdova@vuanch.cz
[3] Fakulta životního prostředí, Katedra technických věd UJEP, Králova výšina 3132/7, 400 96 Ústí nad Labem, e-mail: janos@fzp.ujep.cz

Těkavé halogenované organické látky (VOX) ve vodách představují potenciální rizikový faktor pro zdraví člověka. VOX se dostávají do životního prostředí z antropogenních zdrojů jako součást odpadních vod. Můžou vznikat i v důsledku používaný chloru jako oxidačního prostředku při úpravě vody nebo čištění odpadních vod. Dále mohou vznikat rozkladem halogenovaných organických derivátů vyšší molekulové hmotnosti. Splnění požadavků na zdravotní nezávadnost a kvalitu vody vyžaduje monitorování úrovně VOX ve všech složkách vodního prostředí. Předmětem příspěvku je diskuse některých aspektů analýzy 10 sledovaných chlorovaných VOX ve vodách s ukázkami praktických aplikací vyvinuté metodiky.

6P23

POLYPYRROL VS. POLYANILIN JAKO NOSIČ KATALYZÁTORU V PALIVOVÝCH ČLÁNCÍCH TYPU PEM

Sabina Moravcová, Karel Bouzek

Ústav anorganické technologie,
Vysoká škola chemicko-technologická v Praze,
Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika,
e-mail: moravcos@vscht.cz

Cílem této práce je porovnat vlastnosti polypyrrolu (PPy) a polyanilinu (PAni) s ohledem na jejich možné použití v technologii membránových palivových článků. Naše pozornost se soustředila na syntézu a charakterizaci kompozitu iontově selektivní membrána / vodivý polymer (CP) jako základního stavebního prvku Membrane Electrode Assembly.

PPy byl zvolen jako modelový polymer vzhledem k jeho snadné a reprodukovatelné syntéze a zároveň poměrně dobré chemické a mechanické stabilitě. PAni byl studován z důvodu vysoké stability v kyselém prostředí, které odpovídá prostředí nízkoteplotního palivového článku typu Proton Exchange Membrane (PEM). Jeho syntéza je ve srovnání s PPy složitější. Jedním z důležitých parametrů je teplota, což potvrzuje důležitost popisu kinetiky polymerace.

V prvním kroku byla studována kinetika růstu CP filmu na povrchu membrány Nafion. Z dosažených výsledků vyplývá, že krokem určujícím rychlost růstu vrstvy CP je

transport monomeru vznikajícím CP filmem. Experimentální data byla porovnána s jednoduchým matematickým modelem.

Bylo zjištěno, že modifikací membrány vrstvou CP je snížena i její propustnost pro methanol. Stanovené permeability PPy a PAni jsou přibližně o dva řády nižší ve srovnání se samotnou membránou Nafion. Toto zjištění je důležité s ohledem na možné použití těchto kompozitů v methanolovém palivovém článku.

Následně byla pozorována stabilita připravených kompozitů Nafion / CP.

6P24

EUROSUPPORT MANUFACTURING CZECHIA - NOVÝ HRÁČ V OBLASTI VÝROBY KATALYZÁTORŮ

Milan Řičánek, Alena Círová

Základy výroby katalyzátorů v Československu souvisí s výstavbou chemického kombinátu na výrobu syntetických paliv tlakovým zplyňováním hnědého uhlí za 2. světové války v Záluží na Mostecku.

Potřebné katalyzátory byly původně dodávány z Leuny a Ludwigshafenu, ale po skončení války se začalo okamžitě s vlastní výrobou potřebných katalyzátorů. Při postupné změně surovinové základny z hnědého uhlí na ropu, byla výroba katalyzátorů orientována na procesy zpracování ropných frakcí jako jsou hydrodesulfurizace, hydrodenitrifikace a hydrodeoxidace, reformování lehkých uhlovodíkových frakcí pro výrobu složek automobilových benzinů, hydrokrakování vakuových destilátů pro výrobu olejových hydrogenátů jakožto komponent pro výrobu základů mazacích olejů, katalyzátorů pro hydrogenační úpravu suroviny pro vysokotermickou pyrolýzu pro výrobu etylenu a propylenu apod. Katalyzátory vyráběné ve společnosti Chemopetrol byly postupně rozšiřovány i do dalších průmyslových odvětví národního hospodářství bývalého Československa. Objem výroby katalyzátorů postupně rostl a kulminoval na začátku 70. let. Vnitropolitická situace Československa v tomto období a hospodářská stagnace se projevily i v oblasti výroby katalyzátorů. Výroba katalyzátorů, které jsou charakterizovány jako výrobky s vysokou přidanou hodnotou a vysokým podílem nákladů na jejich rozvoj, vyžaduje velmi dynamickou inovační aktivitu. Potřeba udržet výrobní základnu státu na úrovni, která by minimalizovala zaostávání za ekonomicky vyspělými státy světa, vedla k nutnosti nákupu licencí průmyslových procesů. Na druhé straně tato hospodářská politika státu vedla k návrhům opatření, jak odstranit rizika embarga na součásti licencovaných procesů nezbytných k jejich provozu a eliminovat tak rizika z vyřazení technologií produkujících z hlediska státu strategicky významné produkty (např. pohonné hmoty pro armádu).

Do této politiky zcela logicky patřily i katalytické procesy. Hospodářská situace nutila výzkum a vývoj katalyzátorů, aby byl orientován na náhradu dovozu katalyzátorů z oblasti poskytovatelů licence těchto procesů. Důsledkem bylo určení takových směrů výzkumu katalyzátorů, který kopíroval, někdy i se značným zpožděním, trajektorie vývoje v západních zemích a vedl ke zpomalování realizace výsledků výzkumu v Československu. Realizace výsledků výzkumu si často vyžaduje adaptaci a modernizaci výrobní základny výroby katalyzátorů. Nedostatek finančních prostředků investovaných do výrobny katalyzátorů v bývalém s. p. Chemopetrol způsobil, že řada nadějných výsledků z výzkumu nemohla být převedena do realizační fáze a dále tak prohlubovala stagnaci oboru. Změny politicko-ekonomické situace na počátku 90. let vedly k novému uspořádání řady výrobních organizací. Tyto procesy probíhaly i v bývalém s. p. Chemopetrol a posléze i v Chemopetrol, a.s. Vedení společnosti rozhodlo redefinovat její podnikatelské segmenty a koncentrovat se pouze na klíčové oblasti podnikání. Ostatní podnikatelské aktivity byly postupně vyčleňovány, odprodávány anebo ukončovány. Do neklíčových aktivit byla zařazena i výroba katalyzátorů. Výsledkem několikaletého jednání se společnostmi Unipetrol a Chemopetrol bylo odkoupení výrobny katalyzátorů společností Eurosupport Manufacturing Czechia, s.r.o. Prodej byl realizován tak, že výroba katalyzátorů přešla ke společnosti Eurosupport Manufacturing, s.r.o., od 1.2.2003.

Základními úkoly společnosti po začlenění výrobny katalyzátorů bylo stabilizovat finanční toky, udržet a zachovat stávající okruh zákazníků a připravit společnost na další rozvoj tak, aby bylo dosaženo cílových objemů prodejů.

Klíčovým faktorem úspěchu při výrobě katalyzátorů ve společnosti Eurosupport Manufacturing Czechia, s.r.o., je technická inovace.

V přednášce bude detailně diskutována role jednotlivých pilířů inovačních aktivit ve společnosti. Dále budou popsány mechanismy spolupráce s klíčovými zákazníky v oblasti zavádění výsledků jejich výzkumu do praxe a uvádění výrobků na trh. Bude diskutována úloha a formy výzkumu ve společnosti a spolupráce s externími výzkumnými a vývojovými pracovišti, a to jak v tuzemsku, tak i v zahraničí.

1Po01

MĚŘENÍ KRITICKÉ MICELÁRNÍ KONCENTRACE KATIONAKTIVNÍHO TENZIDU KAPILÁRNÍ ELEKTROFORÉZOU

Dana Bajerová[1], Vítězslav Maier[1], Jana Horáková[1], Jan Petr[1], Dušan Drahoňovský[2], Juraj Ševčík[1]

[1]Katedra analytické chemie, Univerzita Palackého, Tř. Svobody 8, 771 46, Olomouc, Česká Republika, DanneeBaj@seznam.cz
[2]Institute of Inorganic and Analytical Chemistry, Pérolles, University of Fribourg, CH-1700 Fribourg, Switzwerland.

Kapilární elektroforéza se osvědčila pro separaci různých druhů analytů díky vysoké účinnosti, vysokému rozlišení, rychlosti analýzy a velmi malému objemu dávkovaného vzorku. Mezi nejpoužívanější módy této techniky se řadí kapilární zónová elektroforéza (CZE) a micelární elektrokinetická chromatografie (MEKC). MEKC využívá micel vytvářených tenzidy, a s výhodou si jí používá pro separaci neutrálních molekul i iontů. Kritická micelární koncentrace (CMC) tenzidu je jedna z nejdůležitějších charakteristik tenzidů a její znalost je výhodná při vývinu metod separace různých analytů pomocí MEKC.

Studovaný tenzid je nově syntetizovaný (S)-(2,3-dihydroxypropyl)-dodecyl dimethylammonium chlorid (DDAC). Pro stanovení jeho CMC hodnoty byla použita metoda založená na „pohyblivostním“ modelu. Uvedený tenzid byl dále studován jako aditivum pracovního elektrolytu ovlivňující separaci a vliv jeho optické aktivity při chirálních separacích.

Autoři děkují projektu MŠM ČR (MSM 619895216) za finanční podporu práce.

1Po02

NON-CONTROLLED AND CONTROLLED DC ARC AT THE EVAPORATION OF POWDER SAMPLES AT THE SPECTROGRAPHY AND SPECTROMETRY

Jolana Bajuszová, Silvia Ružičková, Ladislav Koller, Mikuláš Matherny, Karol Flórián

Technical University of Košice, Faculty of Metallurgy, Department of Chemistry, Letná 9, SK - 042 00 Košice, Slovak Republic, silvia.ruzickova@tuke.sk; jolana.bajuszova@tuke.sk

The evaporation as a part of the spectrochemical excitation process is a complicated procedure during which overshoot different thermochemical reactions connected with formation of carbides. This one is accelerated namely at the 4000 K on the top of the carrier electrode. The carbid creation expresively affects the evaporation process of single elements of the given matrix and changes this process. In spite of this it is evident that intensity of the DC arc has a significant impact on the evaporation of the all elements.

The evaporation capability of two optical methods, classical direct current (DC) arc spectrography and DC arc optical emission spectrometry, by using of two different ways of evaporation, have been compared for the determination of some environmental important elements (Al, Cr, Ni, and V). The experiments were carried out by using of grating spectrograph PGS-2 and simultaneous multichannel LECO-750 spectrometer which is connected with separated evaporation cell and adjusted to the Marinković plasma source [1]. Normed evaporation curves were designed and half-time ($t_{50\%}$) and total ($t_{100\%}$) evaporation time were calculated. Basic statisticall evaluation was done and main figures of merit (arithmetical mean ($\bar{I}$(x)), standard deviation ($s(\tilde{I})_x$), relative standard deviation (RSD) ($s(\tilde{I})_{x,r}$), median ($\tilde{I}$(x)), modus ($\hat{I}$(x)), halfsum ($\tilde{I}$(x)p), range (ΔI), asymmetry (A(x)), excess (E(x)), which characterized the precision, normality and homogenity of the distribution of the one-dimension intensity input data, were determined [2, 3].

[1] S. Ružičková, E. Jankovská, L. Koller, M. Matherny, *Trans. of the Universities 1*, 13, (2003).
[2] K. Kupka, *QC.Expert™*, Trilobyte, Pardubice (2002).
[3] M. Meloun, J. Militký, *Statistické zpracování experimentálních dat, Ars Magna,* Praha (1998).

1Po03

STUDIUM Ad_n REAKČNÍHO KROKU ENZYMŮ HALOGENALKANDEHALOGENÁZ METODAMI TEORETICKÉ CHEMIE

Pavel Banáš[1], Michal Otyepka[1], Zbyněk Prokop[2], Jiří Damborský[2]

[1]Katedra fyzikální chemie a Centrum biomolekul a komplexních molekulových systémů, Univerzita Palackého Olomouc, tř. Svobody 26, 771 46 Olomouc, ČR
[2]Loschmidtovy laboratoře, Masarykova univerzita v Brně, Kotlářská 2, 611 37 Brno, ČR

Halogenalkandehalogenázy (EC 3.8.1.5.) jsou bakteriální enzymy katalyzující hydrolýzu halogenovaných uhlovodíků na odpovídající alkohol a halogenidový iont. Tyto enzymy jsou důležité z hlediska jejich využití při odbourávání halogenovaných uhlovodíků, v biosenzorech monitorujících znečištění nebo v průmyslové biokatalýze. Reakční mechanismus dehalogenace je dvoukrokový, v prvním kroku vzniká SN2 substitucí alkyl-enzym intermediát esterové povahy, který je v následném kroku (AdN) hydrolyzován bazicky katalyzovanou adicí vody [1-2]. Často je však katalytická účinnost těchto enzymů pro praktické použití nedostatečná. Ke zvýšení aktivity enzymu DhaA z *Rhodococcus* sp. k 1,2,3-trichlorpropanu byla použita metoda řízené evoluce, tzv. chybující PCR [3]. Byly nalezeny a charakterizovány dva proteiny se zvýšenou aktivitou: jednobodový mutant C176Y vykazující trojnásobnou účinnost v porovnání s divokým typem a dvoubodový mutant C176Y+Y273F vykazující osminásobnou účinnost. Mutace

Y273F zruší vodíkovou vazbu mezi hydroxylovou skupinou Y273 a páteřním karbonylem N41. Jelikož páteřní karbonyl N41 je zároveň vázán vodíkovou vazbou ke katalytické vodě, která se podílí na druhém Ad_N reakčním kroku, ovlivňuje mutace Y273F rychlost Ad_N reakčního kroku [4]. K vysvětlení vlivu této mutace je důležitý detailní popis průběhu Ad_N reakce. Nalezení reakční koordináty Ad_N na úrovni *ab initio* výpočtů je komplikované, neboť reakční schéma má mnoho stupňů volnosti. Příspěvek bude diskutovat výsledky získané QM/MM metodou (ONIOM B3LYP/6-31G(d,p)/AMBER(parm96)).

Poděkování autorů patří MŠMT za finanční podporu (granty MSM6198959216, LC05A57 a MSM0021622413) a MetaCentru za výpočetní čas.

[1] Verschueren K. H. G., Seljee F., Rozeboom H. J., Kalk K. H., Dijkstra B. W.: *Nature 363*, 693 (1993).
[2] Ollis D. L., Cheah E., Cygler M., Dijkstra B., Frolow F., Franken S. M., Harel M., Remington S. J., Silman I., Schrag J., Sussman J. L., Verschueren K. H. G., Goldman A.: *Protein. Eng. 5*, 197 (1992).
[3] Newman J., Peat T. S., Richard R., Kan L., Swanson P. E., Affholter J. A., Holmes I. H., Schindler J. F., Unkefer C. J., Terwilliger T. C.: *Biochemistry 38*, 16105 (1999).
[4] Bosma T., Damborský J., Stucki G., Janssen D. B.: *Appl. Environ. Microbiol*. 68, 3582 (2002).
[5] Banáš P., Otyepka M., Vévodová J., Jeřábek P., Boháč M., Petřek M., Damborský J.: *Appl. Environ. Microbiol*., submitted.

1Po04

IDENTIFIKACE HYDRATOVANÉHO OXIDU ZIRKONIČITÉHO NA KOROZNÍ VRSTVĚ SLITINY ZIRKONU

Zuzana Weishauptová, Vladimír Machovič, Lenka Borecká

Ústav struktury a mechaniky hornin AVČR
V Holešovičkách 41, 182 09 Praha 8, Česká republika

Je známo, že oxid zirkoničitý podobně jako ostatní oxidy kovů čtvrté podskupiny se působením vody hydratují a jejich povrch se pokrývá hydratovanou vrstvou, která vzniká jako kompenzace nenasycených povrchových iontů. Tento děj je nutné sledovat v souvislosti s korozním procesem zirkoniových slitin, které jsou používány na povlakové trubky palivového elementu v jaderných elektrárnách, kdy rostoucí požadavky na bezpečnost a ekonomiku jaderného provozu vedou ke snaze detailního poznání korozního procesu. Vliv vzniku hydratované vrstvy oxidu zirkoničitého na probíhající korozní proces nebyl dosud popsán, ačkoliv vznik této hydratované vrstvy byl již potvrzen metodou vnitřních markerů.

V provedené studii byla k identifikaci hydratované vrstvy oxidu zirkoničitého nově použita IR spektroskopie, jejíž techniky vhodné pro povrchovou strukturní analýzu umožňují rozlišení přítomnosti nedisociovaných molekul H_2O a disociovaných OH skupin. Charakterizace děje probíhajícího na rozhraní oxid - voda byla provedena pomocí sorpce vodní páry.

Byl popsán vývoj intensity pásů hydroxylových skupin na srovnávacích vzorcích hydratovaného oxidu zirkoničitého gelového charakteru v teplotním intervalu 380 až 410 oC. Shodné pásy hydroxylových skupin byly zjištěny na vzorku monoklinického oxidu zirkoničitého, jejichž přítomnost lze zdůvodnit dlouhodobým kontaktem se vzdušnou vlhkostí. Rovněž vzorky povlakových trubek exponované v pokusném reaktoru v prostředí H_2O při teplotě 360 ^oC po dobu 42 dní vykázaly na povrchu korozní vrstvy pásy hydroxylových skupin při vlnočtech 3690, 3644, 3622 a 3258 cm^{-1}.

Z isoterem vodní páry proměřených po dlouhodobé evakuaci srovnávacího vzorku monoklinického oxidu zirkoničitého a vzorku reálné korozní vrstvy při 550 ^oC, kdy lze již předpokládat převážnou dehydroxylaci povrchu, byla v obou případech zřejmá ireversibilita sorpčního a desorpčního procesu. To nasvědčuje zřejmě proběhlé chemisorpční reakci za vzniku vazby s hydroxylovou skupinou.

Získané výsledky potvrdily reakci na povrchu korozní vrstvy a použité metody se jeví jako vhodné pro její další studium.

1Po05

NEW HEAVY LABELLED AUXINS FOR MASS SPECTROMETRY

Roman Buchtík[1], Volker Magnus[2], Marek Zatloukal[1], Miroslav Strnad[1]

[1]Laboratory of Growth Regulators, Institute of Experimental Botany AS CR & Palacky University, Šlechtitelů 11, CZ-78371, Olomouc, Czech Republic.
[2]Department of Molecular Biology, Rudjer Boskovic Institute, P.O. Box 1016, Zagreb, Croatia.

The preparation of labelled derivatives of indole-3-acetic acid is important for standardization of Mass spectrometry techniques. We focused on the synthesis of IAA metabolites arising from $[^2H_5]$-indole or $[^2H_5]$-IAA as starting compounds.

In order to increase the number of isotopic atomes in aminoacid IAA conjugates, ^{15}N labelled aminoacids were used for the synthesis. Conjugates of $[^2H_5]$-IAA with ^{15}N-Glycine, ^{15}N-Alanine, ^{15}N-Aspartic acid and ^{15}N-Glutamic acid were prepared by reaction of $[^2H_5]$-IAA succinimide ester with corresponding α-aminoacid in alkaline media. The aliphatic and aromatic ^{15}N labelled aminoacids gave the conjugates via condensation of $[^2H_5]$-IAA chloroformiate anhydride with ^{15}N-Valine, ^{15}N-Leucine, ^{15}N-Isoleucine or ^{15}N-Phenylalanine in strong alkaline media. The same type of reaction was used for preparation of $[^2H_5]$-indole-3-acetamide, where the mixed anhydride of labelled IAA was poured onto the aqueous solution of ^{15}N ammonia.

Indole-3-ethanol and IAA β-D-glucosyl ester were labelled only on the indole ring. $[^2H_5]$-indole-3-ethanol and $[^2H_5]$-indole-3-methanol were prepared by reduction of either $[^2H_5]$-IAA, or $[^2H_5]$-indole-3-carboxylic acid by lithium aluminium hydride.

1Po06

THE STRUCTURE AND STABILITY OF Co(II) AND Fe(III) COMPLEXES WITH *N6*-SUBSTITUTED ADENINE DERIVATIVES: A DFT STUDY

Michal Čajan[1], Zdeněk Trávníček[2]

[1]Laboratory of Growth Regulators and
[2]Department of Inorganic Chemistry
Palacký University Olomouc, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc, Czech Republic
E-mail: cajan@chemi.muni.cz

N-6-Substituted adenine derivatives are members of a group of both natural and artificial compounds named *cytokinins*, which have a large scale of physiological effects regulating the cell cycle.[1] Thus, many of these compounds show a strong cytotoxic effect against some human carcinoma cell lines *via* inhibition of cell cycle regulation enzymes like cyclin-dependent kinases. [2] As we have found, this cytotoxicity may be strongly increased by the coordination of cytokinin-derived compounds to the suitable transition metal like Pt(II), Pd(II), Co(II), Fe(III), etc. [3] Theoretical chemistry and molecular modeling provide qualified information about the structure and properties of such complexes, and together with suitable experimental methods could shed light on the mechanism of their interaction with corresponding proteins.

In this work, we compare the electronic properties of the Co(II) and Fe(III) ions in the perspective of their ability to form complexes with the *N6*-benzyladenine derivatives variously substituted on both adenine and phenyl rings. Special attention is devoted to the quantum chemical analysis of the structure and stability of such complexes in the solid state and the solution. Performed DFT studies as well as comparative experiments indicate substantial differences between the spin states of the central ions as well as in the arrangement of their coordination sphere.

The authors thank for the financial support from the Ministry of Education, Youth, and Physical Training of the Czech Republic (Grant No. MSM6198959218).

[1] Miller C. O., Skoog F., Von Saltza M. H., Strong F. M., *J. Am. Chem. Soc. 78*, 1392, 1955.
[2] Veselý J., Havlíček M., Strnad M., Blow J. J., Donella-Deana A., Pinna L., Leatham D. S., Kato J. Y., Detivaud L., Leclerc S., Meijer L., *Eur. J. Biochem. 224*, 771, 1994.
[3] *For example:* Trávníček Z., Maloň M., Zatloukal M., Doležal K., Strnad M., Marek J., *J. Inorg. Biochem. 94*, 307, 2003.

1Po07

THEORETICAL ANALYSIS OF SYMMETRIC DIMER SYSTEMS: ABSORPTION AND 2D PHOTON ECHO ELECTRONIC SPECTRA

V. Szöcs [a], T. Pálszegi [b], V. Lukeš [b], J. Sperling [c]

[a] Institute of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Mlynská dolina CH2, 842 15 Bratislava, Slovakia, szocs@fns.uniba.sk
[b] Department of Chemical Physics, Faculty of Chemical Technology, Slovak Technical University, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia
[c] Institute of Physical Chemistry, University Vienna, Währingerstrasse 42, A-1090 Wien, Austria

The information content of two-dimensional electronic two-pulse photon-echo (2D-2PE) spectra is used to distinguish between different conformations of electronically coupled symmetric dimers (SDs), which are modeled in terms of two identical, energy-degenerate, excitonically coupled pairs of electronic states in the site-representation. The analysis is based on a recently derived analytical formula for the 2D frequency-domain 2PE signal of symmetric dimers [1,2].

The spectra of conformationally weighted ensembles, composed of either two or four dimers are compared with their one-dimensional (1D) linear absorption counterparts, where excitonic couplings have been estimated on the basis of optimized geometries and site-transition dipole moments calculated by standard semiempirical methods for the bridged bithiophene structure 1,2-bithiophene-2-yl-ethane-1,2-dion ($T_2[CO]_2$). We demonstrate that at least in such simple cases, the highly readable 2D-2PE spectra unambiguously decipher related spectral doublets (clear directional separation of homogeneous and inhomogeneous line broadenings), whereas an assignment on the sole basis of linear absorption becomes rather ambiguous, in particular in the presence of strong homogeneous broadening (due to the fact that in absorption spectra both broadenings are cumulatively present).

This work was supported by the the Slovak Ministry of Education (Vega projects 1/1376/04 ; 1/7355/20, 1/2021/05) and Austrian Science Foundation (Special research Program ADLIS:F016 and project P14884-CHE).

[1] V .Szöcs, T. Pálszegi, A. Tortschanoff, H.F. Kauffmann, *J.Chem.Phys. 116*, 8218 (2002).
[2] V. Szöcs, T. Pálszegi, J. Sperling, V. Lukeš, H. F. Kauffmann, *sent to Chem.Phys.*

1Po08

TRANSPORTNÍ VLASTNOSTI NOVÝCH HETEROGENNÍCH MEMBRÁN NA BÁZI SULFONOVANÉHO POLY(FENYLENSULFIDU)

Z. Cílová[1], K. Bouzek[1], S. Moravcová[1], J. Schauer[2]

[1]Ústav anorganické technologie, VŠCHT Praha, Technicka 5, 16628 Praha 6, CR,cilovaz@vscht.cz
[2]Ústav makromolekulární chemie AV ČR, Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6, CR

Iontově selektivní membrány se postupně staly klíčovým prvkem několika moderních elektrochemických technologií. Velmi perspektivním uplatněním těchto membrán je jejich použití v palivových článcích.

Malý zájem o palivové články typu PEM (Proton Exchange Membrane) byl v minulosti způsoben především nedostačujícími vlastnostmi dostupných membrán. Hlavním průlomem byl vývoj membrán na bázi sulfonovaných perfluorovaných polymerů, jako je Nafion, Flemion či Aciplex. Tyto membrány mají i několik závažných nedostatků. Proto je tedy nezbytné nalézt jejich vhodnou alternativu. Jako vhodné alternativní materiály se v literatuře objevují výhradně homogenní nebo hybridní membrány. Heterogenní membrány byly zatím zřejmě díky větší tloušťce a nižší měrné vodivosti opomíjeny.

Cílem této práce je optimalizace stupně sulfonace připravených heterogenních membrán na bázi sulfonovaného poly(fenylensulfidu) vzhledem k jejich transportním vlastnostem a mechanické a chemické stabilitě.

Byly stanoveny následující charakteristiky membrán v závislosti na jejich stupni sulfonace v rozsahu 19,9 - 56,4%: (1) stupeň zbotnání v inertní atmosféře o různé relativní vlhkosti, (2) iontově výměnná kapacita, (3) kinetika iontové výměny iontů H^+ a Na^+ na základě teorie spřažené difúze a (4) protonová vodivost a z ní následně vyhodnocený difúzní koeficient protonu v membráně.

1Po09

DETEKCE STOPOVÝCH MNOŽSTVÍ 3-AMINOFLUORANTHENU A 3-NITROFLUORANTHENU POMOCÍ BOREM DOPOVANÝCH DIAMANTOVÝCH ELEKTROD

Karel Čížek, Jiří Barek, Jiří Zima

UNESCO Laboratoř elektrochemie životního prostředí, Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Albertov 6, 128 43 Praha 2, e-mail: barek@natur.cuni.cz

V současné době roste poptávka po citlivých a spolehlivých metodách stanovení stopových množství látek, které znečišťují životní prostředí. Do skupiny látek, jež jsou zvláště nebezpečné, patří nitrované polycyklické aromatické uhlovodíky (NPAH), mezi než se řadí 3-nitrofluoranthen (3-NF), a jejich aminoanalogy (APAH), kam patří 3-aminofluoranthen (3-AF). Výskyt 3-NF byl zaznamenán v nejrůznějších environmentálních matricích hlavně pak v emisích spalovacích procesů [1], kdežto 3-AF je hlavním metabolitem biotransformace 3-NF v živých organismech [2]. 3-NF a 3-AF obsahují elektrochemicky snadno redukovatelnou respektive oxidovatelnou skupinu a tudíž lze k jejich stanovení s výhodou použít moderní voltametrické techniky.

Zajímavou novinkou pro sledování elektrochemických dějů jsou elektrody na bázi borem dopovaného diamantového filmu (BDDE) [3]. Ve srovnání s ostatními uhlíkovými elektrodami se BDDE vyznačuje mimořádnou stabilitou. Její elektrochemické vlastnosti jsou ovlivňovány zejména typem dopantu a jeho koncentrací, morfologickými vlastnostmi, přítomností nediamantového uhlíku a druhem povrchové terminace. Potenciálové okno u BDDE bývá relativně veliké, kolem 3,1 V, a umožňuje na jedné elektrodě sledovat jak redukční tak i oxidační děje. V tomto příspěvku bude věnována pozornost využití BDDE pro stanovení stopových množství 3-NF na základě jeho redukce a 3-AF na základě jeho elektrochemické oxidace v průtokovém i neprůtokovém uspořádání.

Tato práce byla finančně podporována Grantovou agenturou České republiky (grant 203/03/0182).

[1] Jacob J., Karcher W., Belliardo J.J., Dumler R., Boenke A.: Fressenius J. Anal. Chem., 340, 755 (1991).
[2] Ball L.M., Stocking L.M., Kohan M.J., Warren S.H., Lewtas J.: Mutagenesis, 10, 497, (1995).
[3] Show Y., Witek M.A., Sonthalia P., Swain G.M.: Chem. Mater., 15, 879 (2003).

1Po10

TRACE ANALYSIS OF LEAD IN SMALL VOLUME SAMPLES BY ANODIC STRIPPING VOLTAMMETRY WITH COLLECTION AT INTERDIGITATED MICROELECTRODES

Miroslav Rievaj, Zuzana Dovalovská, Dušan Bustin

Department of Analytical Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology,SK-812 37 Bratislava, Radlinského 9, zuzana.dovalovska@stuba.sk

Growing concerns about heavy-metal contamination has led to increasing needs to monitor trace metals in a variety of matrices. Anodic stripping voltammetry (ASV) because of its remarkably low detection limits was used traditionally in connection with the static mercury drop or rotating mercury film electrodes. Recently there has been a considerable interest in stripping analysis of very small sample volumes, in connection with microvolume determinations of trace elements. Various microcells of special geometries and reduced size electrodes have been developed for heavy metal ions determinations in microliter (0.005-0.100 cm^3) samples [1]. Such monitoring procedures have recently received growing attention in connection with screening of lead blood levels in contaminated sites [2]. IDA microelectrodes - sensors based on screen printed technology - enable a new approach in stripping analysis. Their use is advanta-

geous not only for microscale measurements, use in quiescent solutions, but offers also an improved plating efficiency and assays without supporting electrolytes [3].

This paper describes the utility of mercury coated microband interdigitated microelectrodes for performing stripping assays in total sample volumes as small as 0.02 cm3. Pb in blood samples 10-fold dilution with 0.3 M HCl solution was determined by the standard addition method. The commercially available IDA microelectrodes (from ALS Japan Inc.) based on a thin carbon film technology were used. Their carbon based arrays served as substrates for the electrochemically pre-deposited mercury film.

[1] Wang J., Rongrong X., Tian B., Wang Ji., Renschler C. L., White, C. A., *Anal. Chim. Acta 293*, 43-48 (1994).
[2] Wang J., Lu J., Tian B., Yarnicky Ch., *J. Electroanal. Chem. 361*, 77-83 (1993).
[3] Wang J., Tian B., Wang Ji., Lu J., Olsen C., Yarnicky Ch., Olsen K., Hammerstrom D., Bennett W., *Anal. Chim. Acta 385*, 429-435 (1999).

1Po11

BIOLOGICKY AKTIVNÍ Fe(III) KOMPLEXY S CYTOKININOVÝMI DERIVÁTY

I. Popa[b], L. Dvořák[a], J. Mikulík[a], Z. Trávníček[a,b,*]

[a]*Katedra anorganické chemie, Univerzita Palackého, Křížkovského 10, Olomouc CZ-771 47, Česká republika, email: trav@risc.upol.cz*
[b]*Laboratoř růstových regulátorů, Univerzita Palackého a Ústav experimentální botaniky AV ČR, Šlechtitelů 11, Olomouc CZ-783 71, Česká republika, e-mail: popa@prfholnt.upol.cz*

Práce je zaměřena na syntézu, charakteristiku a studium biologické aktivity (cytotoxicity a inhibice cyklin dependentních kináz) komplexních sloučenin železa(III) s deriváty 6-benzyl-aminopurinu (HL_a), N_6-benzyladenosinu (HL_b) a 6-benzylamino-9-isopropylpurinu (HL_c). Byly získány tyto typy komplexů: $[Fe(HL_a)Cl_3].xH_2O$, $[Fe(H_2O)Cl_2(L_a)].xH_2O$, $[Fe(HL_b)Cl_3].xH_2O$, $[Fe(H_2O)Cl_2(L_b)].xH_2O$, $[Fe(HL_c)Cl_3].xH_2O$, kde x = 0-2. Sloučeniny byly charakterizovány chemickou analýzou prvků (CHN), IR, EPR, NMR a ^{57}Fe Mössbauerovou spektroskopií, magnetochemickými a vodivostními měřeními a termickou (TGA a DSC) analýzou. Z výsledků výše uvedených fyzikálních technik vyplývá, že ionty Fe(III) se nacházejí ve vysokospinovém uspořádání a jsou tetraedricky koordinovány. Dále bylo zjištěno, že ligand typu HL_a je koordinován na Fe(III) přes atom dusíku N_9 imidazolového kruhu, zatímco v případě ligandů HL_b a HL_c probíhá koordinace přes atom N_7. U komplexů byla studována jejich cytotoxicita na vybraných lidských nádorových liniích a inhibice cyklin-dependentních kináz. Vzájemný vztah mezi strukturou a biologickou aktivitou bude diskutován v rámci prezentace.

Autoři děkují za finanční podporu následujícím grantům: GA ČR (203/04/1168) a MŠMT (MSM 6198959218).

1Po12

ŠTATISTICKÉ POROVNANIE KVALITY MERANIA U RÔZNYCH TYPOV ISE A POSÚDENIE VPLYVU STARNUTIA V PODMIENKACH RUTINNÝCH STANOVENÍ

Tomáš Fazekaš, Jarmila Oremusová, Martina Iváková

Farmaceutická fakulta Univerzity Komenského v Bratislave, Odbojárov 10, 832 32 Bratislava, fazekas@fpharm.uniba.sk

Hodnotili sa vlastnosti vybraných typov iónovoselektívnych elektród (ISE) pre priame potenciometrické stanovenie katiónov pri rutinných analýzach plnoautomatickým prietokovým analyzátorom.

Výsledky a diskusia: Vyhodnocovali sa stanovenia tromi Na^+ ISE, tromi K^+ ISE a dvomi Ca^{2+} ISE vo vyše tisícky vzoriek krvného séra spolu s výsledkami pravidelne opakovaných stanovení vo vzorkách 13 šarží referenčných sér. Výsledky stanovení sa sledovali v závislosti od dĺžky času používania, pričom časové intervaly boli 120 - 1500 dní používania. Posudzovala sa presnosť a správnosť stanovení ISE pomocou opisnej štatistiky a testovaním hypotéz: zhody strednej hodnoty s referenčným sérom (Z-test), zhody rozptylov sérií meraní (F-test), posúdenie rovnosti či nerovnosti úrovní variability medzi šaržami (ANOVA). Vzhľadom na možnosť postupného opotrebovania sa hodnotil aj časový faktor testovaním lineárneho modelu starnutia (iteračný a Pearsonov test).

Najvyššia správnosť meraní bola dosiahnutá u meraní s Na^+ ISE, kým najnižšia s Ca^{2+} ISE. Rozdiely v presnosti boli medzi jednotlivými druhmi elektród štatisticky nevýznamné. Výsledky ukazujú, že kvalita meraní s hodnotenými ISE nebola homogénna v čase. Vyskytovali sa odchýlky od presnosti a správnosti meraní, ktoré v skúmaných súboroch nemali charakter náhodného výskytu, čo by mohlo potvrdzovať predpoklad, že odchýlky v kvalitatívnych parametroch meraní boli spôsobené dobou používania.

Záver: Použité štatistické hodnotenie časového faktora opotrebovania môže byť dobrým nástrojom pre optimálne využitie ISE v praxi.

Táto práca vznikla s podporou grantu agentúry VEGA 1/1183/04

1Po13

SLEDOVANIE ZMIEN KORÓZNEHO POTENCIÁLU SYSTÉMU Fe PRÁŠOK / POVLAK NIKLU

Zuzana Fečková, Ladislav Lux, Ľubomír Pikna

Katedra chémie, Hutnícka fakulta TU Košice, Letná 9, 042 00 Košice, Slovenská republika
Zuzana.Feckova@tuke.sk

Dôležitú úlohu v oblasti povrchových úprav zohrávajú elektrochemicky vylúčené kovové povlaky. Tieto povlaky majú široký rozsah použitia, od mikroelektroniky až po koróznu ochranu materiálu [1].

Pri elektrochemickej korózii prebieha na povrchu kovu anódová reakcia (oxidácia kovu), ktorá je výmenou elektrického náboja spojená s katódovou reakciou (redukcia depolarizátora). Stav rovnováhy je charakterizovaný koróznym potenciálom. V procese korózie pod vplyvom okolitého prostredia dochádza buď k rozpúšťaniu (solvatácii) oxidovaného kovového katiónu - aktívna korózia, alebo dochádza k tvorbe nerozpustného oxidového filmu na povrchu kovu, ktorý mení jeho potenciál a poskytuje mu určitý druh ochrany - pasivácia. Ak prebieha anodické rozpúšťanie kovu v prostredí (elektrolyte), ktorého zloženie minimalizuje účinok pasivácie (lebo celkom sa odstrániť nedá), potom je možné takýto systém analyzovať pomocou elektrochemických analytických metód.

Elektrochemickej antikoróznej úprave je možné podrobiť aj práškové materiály s cieľom získať na ich povrchu rovnomerný súvislý povlak kovu [2,3]. Voltampérometria imobilizovaných mikročastíc (VIM) s využitím primeranej (napr. grafitovej) pracovnej elektródy je metóda vhodná na skúmanie elektrochemických vlastností takto pripraveného prášku.

Práca sa zaoberá skúmaním zmien korózneho potenciálu systému, ktorý tvorí Fe prášok imobilizovaný na parafínom impregnovanej elektróde (PIGE), na ktorú je následne vylučovaný povlak niklu rôznej hrúbky. Tieto zmeny sa sledujú v elektrolyte obsahujúcom anióny, ktoré sa bežne označujú ako aktivátory korózie.

Použitie voltampérometrie imobilizovaných mikročastíc (VIM) na stanovenie korózneho potenciálu kovov sa ukázalo veľmi vhodným jednak kvôli jednoduchosti prevedenia, a jednak kvôli vysokej presnosti (≤ 0,5%) [4].

Príspevok vznikol s podporou GA SR VEGA č. 1/1108/04 a agentúry APVT grant č. 20-009404.

[1] Pasa, A. A., Schwarzacher, W., Electrodeposition of Thin Films and Multilayers on Silicon. *Phys. Stat. Sol.*, 173: 73-84 (1999).
[2] Turoňová, A., Kabátová, M., Surface treatment of the powder material by metal coatings; Microscopic study of the deposit on the Fe powder. In: *Vrstvy a povlaky,* Trenčín, s. 146-150, (2003).
[3] Lux, L., Stašková, R., Gálová, M., *Acta Chim., Models in Chemistry* 133: 1-5 (1996).
[4] Pikna, Ľ., Gálová, M., Lux, L., Sledovanie koróznych vlastností práškového železa, *Acta Mechanica Slovaca*., 2: 27-32 (2002).

1Po14

ELEKTROCHEMICKÉ VYLUČOVANIE LANTÁNU

Jana Gabčová, Vladimír Danielik

Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Katedra anorganickej technológie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, jana.gabcova@stuba.sk

Najčastejšie diskutovaným problémom jadrovej energetiky je zadná časť palivového cyklu. Otázka definitívneho riešenia zaobchádzania s vyhoreným jadrovým palivom sa stáva veľmi naliehavou. Jednou z možností na prepracovanie vyhoreného jadrového paliva je použitie roztavených solí na separáciu zložiek a ich následná elektroextrakcia z tavenín. Táto práca je príspevkom k riešeniu uvedenej problematiky.

Podľa poznatkov z literatúry sme ako modelovú zlúčeninu zvolili oxid lantanitý, pomocou ktorého testujeme správanie sa štiepnych produktov z vyhoreného jadrového paliva. Rozpustnosť oxidu lantanitého sme sledovali v taveninách fluoridov alkalických kovov a hexafluorohlinitanov. Namerali sme fázové diagramy nasledovných sústav: LiF - La_2O_3, NaF,- La_2O_3, KF - La_2O_3, Na_3AlF_6 - La_2O_3, K_3AlF_6 - La_2O_3. Na základe získaných znalostí o rozpustnosti oxidu lantanitého v daných taveninových sústavách sme sa zamerali na elektrolytické vylučovanie lantánu z tavenín fluoridu lítneho a hexafluorohlinitanu sodného.

Merania sa uskutočnili v peci s inertnou atmosférou s regulovaným teplotným režimom a chladeným plášťom. Elektrochemické merania sme realizovali pomocou zdroja jednosmerného prúdu. Príslušné soli sa navažovali do grafitového téglika s vnútorným korundovým puzdrom. Anóda bola grafitová v tvare valca upevnená na oceľovej tyčke, katóda hliníková (vrstva hliníka na dne), resp. medená (medený pliešok s vodičom). Lantán sa redukoval na katóde, v ktorej sa jeho obsah zisťoval rtg. mikroanalýzou. Experimentálne merania ukázali, že najlepšou kombináciou je elektrolyt na báze fluoridu lítneho s 2 mol. % oxidu lantanitého s oddeleným elektródovým priestorom (prepážka z nitridu boritého) s uhlíkovou anódou a medenou katódou. Dosiahnutá prúdová účinnosť bola 11,5%, čo je povzbudivý výsledok pre ďalšiu etapu výskumu.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu vedy a techniky na základe Zmluvy č.APVT-20-000204.

1Po15

VOLTAMMETRIC AND HPLC-UV-VIS DETERMINATION OF PACLITAXEL IN THE PRESENCE OF HYALURONIC ACID

Miroslav Gál[a, b], Martina Medová[b]

[a] *J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry, Dolejškova 3, 182 23 Prague 8, Czech Republic*
[b] *CPN s.r.o, Dolní Dobrouč 401, 561 02, Czech Republic*

Analytical methods for determination of antitumor

agent paclitaxel (PXT) both, free and in the presence of potential drug deliverer hyaluronic acid (HA) in the physiological saline solution (PSS) via differential pulse voltammetry (DPP) at HMDE and HPLC - UV - VIS spectrometry have been developed. The first method (DPP) allows to achieve a detection limit of 3.3 ng ml^{-1} and limit of quantification of 5.2 ng ml^{-1} without any accumulation time at -1.25 V vs. Ag/AgCl/1M LiCl reference electrode. Moreover, information about the mechanism governing the reduction of PXT can be obtained combining DPP with cyclic voltammetry and AC polarography. The second one (HPLC) allows to achieve detection limit of 8.5×10^{-4} mg ml^{-1} at λ = 220nm and 8.3×10^{-4} mg ml^{-1} at λ = 230 nm (all according to ISO 11843-2). Isocratic elution, mobile phase acetonitrile:PSS and Spherisorb ODS 2 (C_{18}), 5 µm, 4.6x250 mm column was used in the case of free PXT. The elution time was 5.56 min (fast analysis). In the presence of hyaluronic acid gradient elution was used due to precipitation of hyaluronic acid in the acetonitrile:PSS=90:10. Excellent separation was achieved and the detection limit for PXT in the presence of HA was in the same order as for free PXT. The QCExpert program (TriloByte, Czech Republic) was employed for the linear regression analysis.

1Po16

PHARMACOKINETIC STUDY OF CYTOKININ-DERIVED COMPOUNDS IN MURINE BLOOD SAMPLES

Eva Hauserova[1], Karel Dolezal[1], Marian Hajduch[2], Miroslav Strnad[1]

[1]Laboratory of Growth Regulators, Palacký University and Institute of Experimental Botany ASCR, Slechtitelu 11, 783 71 Olomouc, Czech Republic
[2] Laboratory of Experimental Medicine, Palacky University, Hněvotínská 3, 772 00 Olomouc, Czech Republic

This work is focused on study of pharmacokinetics of interesting cytokinin-derived compounds in mice blood samples.

Cytokinins are plant hormones that trigger a wide range of biological processes in plants. Moreover, some of the cytokinin-derived compounds additionally substituted at C-2 and N-9 positions (olomoucine, roscovitine, purvalanol A) are known as specific inhibitors of cyclin-dependent kinases. Cyclin-dependent kinases are responsible for phosphorylations during cell division cycle and therefore they represent an attractive pharmacological target. High cytotoxicity of several cytokinin analogues against CEM and HL-60 leukaemia cell lines therefore stimulated our interest in these cytokinin analogues as potential anticancer compounds.

We performed a pharmacokinetic study on per oral bioavailability. The experimental Balb/c mice were treated with two cytokinines (N^6-substituted adenosines) and eight trisubstituted purines (including roscovitine and olomoucine II) in methylcelullose gel. The samples were analysed by high performance liquid chromatography (Waters; model Alliance 2690) linked to a Micromass ZMD mass spectrometer and photodiode array detector.

Bioavailability of these compounds two hours after the treatment was determined. Selected compounds were further tested in more details; their concentrations in murine serum in a time-course experiment were also examined.

1Po17

POUŽITIE PERMEABILNÝCH REAKČNÝCH BARIÉR NA OZDRAVENIE KONTAMINOVANÝCH SPODNÝCH VÔD

Mária Heželová[1], Daniela Kladeková[2], Ladislav Lux[1]

[1] Katedra chémie, Hutnícka fakulta TU Košice, Letná 9, 042 00 Košice, Slovenská republika, Maria.Hezelova@tuke.sk
[2] Ústav chemických vied, Katedra fyzikálnej a analytickej chémie, Univerzita P.J. Šafárika, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovenská republika

Permeabilné reaktívne bariéry (PRB) sú tvorené pasívnymi *in situ* zónami reaktívneho materiálu, ktorý degraduje, sorbuje, precipituje alebo odstraňuje chlórované organické zlúčeniny, aromatické nitrozlúčeniny, ťažké kovy a iné polutanty spodných vôd. Mechanizmus spočíva v pretekaní kontaminovanej spodnej vody cez PRB lokalizovanú v pôde určitej priemyselnej lokality, dôsledkom čoho dochádza k spomínaným procesom príslušnej škodlivej látky s reaktívnym materiálom bariéry. Najčastejšie používaným materiálom pre konštrukciu PRB býva elementárne práškové železo, prípadne zmesi práškov Fe/ Al, Fe/ Pd, ako aj aktívny uhlík, zeolity a i.[1] Podstatou degradácie je chemická alebo biologická premena kontaminantov na menej škodlivý produkt, prípadne ide o odstránenie nebezpečných zložiek pomocou adsorpcie alebo komplexácie, precipitáciou možno docieliť fixáciu kontaminantov v nerozpustných zlúčeninách a mineráloch.

Pri konštrukcii PRB je potrebné zohľadniť mnohé kritériá. Z hľadiska študovanej lokality ide o charakter spodnej vody a koncentráciu kontaminantu. Z hľadiska samotnej PRB je to výber vhodného reaktívneho materiálu, určenie času životnosti PRB, ako aj hrúbky bariéry. Nakoniec, reaktívny materiál sa musí vyznačovať dobrou selektivitou pre cieľové kontaminanty, rýchlymi reakčnými rýchlosťami, vysokou hydraulickou priepustnosťou, environmentálnou kompatibilitou a nízkou cenou. Napriek mnohým komplikujúcim faktorom sú PRB už reálne existujúce napr. v Anglicku a Severnom Írsku (Belfast), ako aj v USA [2,3].

Príspevok zahrňuje prehľad doterajšieho výskumu týkajúceho sa tejto environmentálne prospešnej štúdie, ako aj naše experimenty redukčných reakcií niektorých vybraných organických látok (nitrobenzén, kyselina pikrová) a anorganických látok (dusitany, dusičnany) s Fe, pomocou dvojhodinovej kontinuálnej elektrochemickej detekcie koncentrácií degradujúcich látok. Bol pozorovaný pokles koncentrácie jednotlivých sledovaných kontaminantov vplyvom ich reakcie s kovovým práškom.

Príspevok vznikol s podporou GA SR VEGA č. 1/1108/04 a 1/2118/05 a agentúry APVT grant č. 20-009404.

[1] Scherer M.M., Richter S., Valentine R.L., Alvarez P.J.J., *Critical Reviews in Environmental Science and Technology, 30* (3), 363-411, (2000).
[2] Marcus D.L., Bonds Ch., *Journal of Hazardous Materials, 68*, 125-153, (1999).
[3] Bone B., *Permeable Reactive Barriers: Technology Overview and New Agency Guidance*, First International Symposium on PRBs, Belfast (2004).

1Po18

SIZE EXCLUSION ANALYSIS OF ORGANIC MATTER IN POWER PLANT WATER

Jan Hilbert[1], Ivo Jiříček[1], Elsa Lundanes[2]

[1] Department of Power Engineering, ICT Prague, Technická 5, Prague 6, hilbertj@vscht.cz
[2] Department of Analytical Chemistry, University of Oslo, Norway

Recent failures of turbines and heaters in power plants were atributed to steam/water cycle impurities especially organic breakdown products. Some organic compounds are difficult to separate in water treatment station, its thermal degradation to acids can cause corrosion of power plant appliances.

Current monitoring of organic compounds by overall indicators like chemical oxygen demand (COD) or total organic carbon (TOC) does not identify the individual organic species. On-line monitoring of these species could help to increase the understanding of the problems caused by organics.

In my work the size exclusion analysis of organic matter in power plant water samples was pursued. In this method 4.6 x 30 mm TSKgel - SW2000 HPLC column was used. The column was connected to UV and evaporative light scattering detector (ELSD). The main task was to separate organic matter depending on its molecular weight and to find suitable mobile phase for the column and ELSD.

It was found that the mixture of ammonium acetate buffer (0.1M) and the ammonia salt of trifluoroacetic acid (pH 7, 0.2M) is a suitable mobile phase for this column connected UV detector and ELSD. Tap and river water samples were charecterized by SEC. Organics in these samples were fractionated in several groups according to their molecular weight. The problem with the detection limit of low concentration organic compounds in water samples has been solved by effective preconcentration procedure.

This work was supported by research project MSM 6046137304.

1Po19

MIKROFLUINÍ ANALYTICKÝ SYSTÉM PRO MONITOROVÁNÍ AMINOKYSELIN V BIOLOGICKÝCH TEKUTINÁCH: PŘÍPRAVA PŘEDLOHY PRO ODLÉVÁNÍ PLASTOVÝCH MIKROČIPŮ

Z. Hoherčáková[a], V. Jurka[b], P. Tůma[c], F. Opekar[a]

[a] Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Universita Karlova, Albertov 2030, 128 43 Praha 2, zhoher@seznam.cz,
[b] Oddělení fyziky povrchu a rozhraní, Fyzikální ústav AV ČR, Cukrovarnická 112, 162 53 Praha 6,
[c] Oddělení lékařské chemie a biochemie, 3. lékařská fakulta, Universita Karlova, Ruská 87, 10000 Praha 10

Mikrofluidní systémy, zejména čipy pro kapilární elektroforézu (CE), nacházejí v analytické chemii početné aplikace1. CE na mikročipu nabízí v porovnání s konvenční CE velmi krátké doby analýz, má nižší spotřebu vzorku i separačního elektrolytu a také nižší nároky na zdroje vysokého napětí. Nejpoužívanějším materiálem pro výrobu analytických mikrosystémů je poly(methyl methakrylát) (PMMA)2, k jeho přednostem patří velká chemická i mechanická stabilita a dobrá podpora elektroosmotického toku1.

Jednoduchá a efektivní metoda pro výrobu kvalitních PMMA mikročipů je založena na odlévání za laboratorních podmínek3. Tento postup spočívá v UV-iniciované polymeraci roztoku methyl methakrylátového (MMA) monomeru za normálního tlaku. Křemíkové mikrostruktury jsou obtisknuty do polymerního substrátu odléváním roztoku monomeru do jednoduché formy. Předlohy pro odlévání mikročipů jsou fotolitograficky přeneseny na monokrystalické křemíkové substráty pokryté 100 nm vrstvou oxidu křemičitého a vytvořeny chemickým leptáním, nejprve v pufrované kyselině fluorovodíkové a posléze ve 40% hydroxidu draselném. Tento postup, který lze provádět v laboratoři s běžně dostupným vybavením, má i zjevné nevýhody. Krystalová struktura křemíkových substrátů dovoluje vytvářet pouze přímé separační dráhy, což významně limituje jejich délku a orientaci. Zpracování ve výše uvedených agresivních leptadlech je zdlouhavé a musí být prováděno s přiměřenou opatrností. Je zřejmé, že kvalita vyrobené předlohy se odráží ve výsledné kvalitě a pou-žitelnosti odlévaných mikročipů.

V tomto příspěvku je uveden nový, výrazně zjednodušený způsob přípravy předloh pro odlévání plastových mikročipů. Požadované motivy jsou vytvořeny z negativního fotorezistu SU-8 (Microchem Corp., USA) na křemíkových substrátech. SU-8 je epoxidový fotorezist speciálně vyvinutý pro mikroelektomechanické sensory (MEMS), který umožňuje vyrábět chemicky a termálně velmi odolné struktury, vhodné jako konstrukční materiál. SU-8 se zpracovává pouze fotolitograficky a tudíž krok chemického leptání úplně odpadá. Dále tato technologie umožňuje výrobu mikročipů se zatočenými separačními kanály. Mikročipy se tak mohou dále miniaturizovat, případně lze prodloužit separační dráhu a tak docílit lepší separaci směsi. S použitím jedné takové předlohy bylo vyrobeno až několik desítek velice kvalitních mikročipů s

dobrým rozlišením, které byly dále použity ve spojení s bezkontaktní vodivostní detekcí pro monitorování aminokyselin v biologických tekutinách.

Práce vznikla za finanční podpory GAČR, projekt 203/04/0519.

[1] Becker H., Locascio L. E.: *Talanta 56*, 267 (2002)
[2] Ford S. M., Kar B., McWhorter S., Davies J., Soper S. A., Klopf M., Calderon G., Saile V.: *J. Microcolumn Sep. 10*, 413 (1998)
[3] Muck A., Wang J., Jacobs M., Chen G., Chatrathi M.P., Jurka V., Výborný Z., Spillman S. D., Sridharan G., Shoning M. J.: *Anal. Chem. 76*, 2290 (2004).

1Po20

MATRIX MODIFICATION FOR THE DETERMINATION OF SELECTED METALS IN URINE BY D2-GFAAS

L. Husáková, J. Šrámková

Department of Analytical Chemistry, Faculty of Chemical Technology,University of Pardubice, Pardubice, nám. Čs. legií 565, CZ-532 10, Czech Republic, Lenka.Husakova@upce.cz

Different chemical modifiers were employed in order to minimize the interferences on the direct determination of Cd and Pb in human urine by graphite furnace atomic absorption spectrometry instrumentation equipped with deuterium background correction system (D_2-GFAAS). The critical comparative study dealing with pyrolysis and atomization temperatures, detection limits, characteristic masses, accuracy and recoveries was performed for all modifiers tested. In the case of Cd, the best analytical recoveries were obtained in the presence of Pd + Sr and Pd + $Mg(NO_3)_2$ modifier. Using these modifiers the detection limits (DLs) at injection of 10-µl aliquot of a sample were 0.13-0.21 µg l^{-1} and characteristic masses were 0.36-0.39 pg. In the case of Pb, the recoveries close to 100 % were achieved in the presence of NH_4F, Pd + Sr and Pd + NH_4F modifier. The DLs and characteristic masses at injection of a 10-µl aliquot of a sample were 1.2-2.6 µg l^{-1} and 4.9-7.3 pg, respectively. Typical relative standard deviation values (n = 3) were bellow 5 % for both Cd and Pb. The accuracy of the procedure was checked by the analysis of the certified reference materials, through the analytical recoveries and by inter-laboratory comparison with transversely heated Zeeman graphite furnace atomic absorption spectrometry.

1Po21

PREPARATION AND CHARACTERIZATION OF TRANSPARENT TiO_2 COATED GLASS

Jana Chovancová, Jana Chomoucká, Michal Veselý

Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Department of Physical and Applied Chemistry, Purkyňova 118, 612 00 Brno, Czech Republic, chovancova@fch.vutbr.cz

Titanium dioxide thin films on soda-lime glass tubes and plates were prepared by the sol-gel method using spin-coating process. In the case of glass plates, the effect of different titanium alcoxides, number of coatings and spin-coating process rate on the prepared films photocatalytic efficiency were studied.

Pieces of glass to be coated were boiled in 9 M sulfuric acid before the actual coating process in order to decrease the sodium ions detrimental migration from soda-lime glass into the photocatalytic film particularly during the calcination process.

Glass tubes and plates prepared in this manner were used for the construction of a multi-tube flow reactor and of a glass-plate reactor. Medium pressure mercury lamp was used as a source of UV light. The solution of 1.10^{-5} M 2,6-dichloroindophenol (2,6 - DCIP) was used as a model compound for evaluating of photocatalytic efficiency. The thickness of the titanium dioxide transparent layer on glass plate was measured by SEM. The decrease of 2,6 - DCIP concentration during the photocatalytic reaction was evaluated by UV-VIS spectrometry and HPLC method.

The invention is directed to use of the optically transparent TiO_2 thin films under ultraviolet irradiation in killing yeasts in the environment.

[1] Heller A., Paz Y.: *PCT Int. Appl.* WO 97/07069, (1997).
[2] Fretwell R., Douglas P.: *J. Photochem. Photobiol. A: Chem.*, 143, 229, (2001).
[3] Oh S. H., Kim D. J., Hahn S. H., Kim E. J.: *Mater. Lett.*, *57*, 4151, (2003).

1Po22

VYUŽITIE CHRONOAMPÉROMETRIE PRECHODOVÝCH PRÚDOV IDA MIKROELEKTRÓDY NA BEZKALIBRAČNÉ STANOVENIE ELEKTROAKTÍVNYCH LÁTOK

Pavlína Jenčušová, Peter Tomčík, Dušan Bustin, Miroslav Rievaj

Katedra analytickej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovenská republika e-mail: pavlina.jencusova@stuba.sk

IDA mikroelektróda sa použila na bezkalibračnú chronoampérometrickú analýzu. Elektroaktívne látky

generované lineárnym nárastom potenciálu vo vhodnom rozsahu na jednom segmente IDA (generátore) difundovali k povrchu druhého segmentu IDA (kolektoru), kde sa ampérometricky detegovali. Analytický signál z IDA systému sa získal použitím bipotenciostatu v duálnom móde. Takto dochádzalo k tzv. redox cyklovaniu na navzájom susediacich segmentoch, čo malo za následok amplifikáciu signálu. Polovičný čas, za ktorý pri nábehu redox cyklovania dosiahne kolektorový segment ustálený prúd je nepriamoúmerný difúznemu koeficientu [1]. Difúzny koeficient je jedinou veličinou, kvôli ktorej sa musí robiť kalibrácia, keďže ostatné veličiny možno stanoviť nezávislým meraním. Pri tejto metóde sa difúzny koeficient vypočíta z času t0,5 preto postup umožňuje úspešne sa vyhnúť kalibrácii. Metóda sa overila na modelových vzorkách vodných roztokov $[Fe(CN)_6]_{4-}$, $[Ru(NH_3)^6]^{3+}$. Na výpočet koncentrácie týchto elektroaktívnych látok za podmienok ustáleného prúdu sa použil vzťah,

$$c = \frac{(I_a)_{SS}\, t_{0,5}}{0,9\left(W_g + \frac{W_e}{6}\right)^2 zFb \frac{K(1-p)}{K(p)}}$$

kde $0,9(Wg+We/6)^2$ - difúzna dráha, W_e - hrúbka pásu IDA mikroelektródy (5 a 10 μm) , W_g - hrúbka medzery medzi kolektorovým a generátorovým segmentom IDA mikroelektródy (5 a 10 mm), K(1-p)/K(p) - úplný eliptický integrál, b - súčet dĺžok rozhraní, ktorými sa produkt generátora dostáva na kolektor, $t_{0,5}$ - čas, pri ktorom I_{coll} dosiahne polovicu I_{ss}, $(I_a)_{ss}$ - anodický prúd v ustálenom stave. Testovaním stanovenia štandardných roztokov sa ukázalo, že táto nová metóda poskytuje správne a dostatočne presné výsledky pre roztoky s koncentráciou okolo 1 $mmol.dm^{-3}$.

[1] Aoki K., Tanaka M., *J. Electroanal. Chem., 266*, 11-20, (1989).

1Po23

ALTERNATÍVNA FORMULÁCIA R12 PRÍSTUPU S POUŽITÍM POMOCNEJ BÁZY PRE PODMIENKU ÚPLNOSTI

Stanislav Kedžuch, Jozef Noga

Ústav anorganickej chémie, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, uachksta@savba.sk

Už v počiatkoch kvantovej chémie bolo zrejmé, ža na popis blízkych medzielektrónových interakcií (Coulombický hrot) [1] je potrebné do rozvoja vlnovej funkcie zahrnúť člen r_{12} (vzdialenosť elektrónov) [2]. Medzi takéto explicitne korelované metódy patrí aj R12 prístup [3].

V tejto práci je navrhnutá alternatívna formulácia R12 prístupu. V porovnaní s pôvodným prístupom je výpočtovo menej náročný, zabezpečuje rýchlejšiu konvergenciu k presnej hodnote v závislosti od veľkosti použitej bázy atómových funkcií, kladie menej prísne nároky na rozsah použitých báz a neuvažuje sa a priori platnosť rozšíreného či zovšeobecneného Brillouinovho teorému.

[1] T. Kato, Commun. *Pure Appl. Math. 10*, 151 (1957).
[2] E. A. Hylleraas, *Z. Phys. 54*, 347 (1929).
[3] W. Kutzelnigg a W. Klopper, *Journal of Chemical Physics 94*, 1985 (1991).

1Po24

ROZPUSTNOST HUMINOVÝCH KYSELIN VE VODNÝCH ROZTOCÍCH

Martina Klučáková, Ondřej Pilný, Petr Sedláček

Ústav fyzikální a spotřební chemie, Fakulta chemická VUT v Brně, Purkyňova 118, 612 00 Brno, Česká republika, klucakova@fch.vutbr.cz

Huminové kyseliny jsou, stejně jako ostatní huminové látky, definovány pouze na základě rozpustnosti. Nejsou tedy chemických individuem ale směsí organických látek různé struktury, vlastností a molekulové hmotnosti. Jestliže jsou huminové kyseliny definovány jako frakce huminových látek, která je nerozpustná při pH < 2, nabízí se možnost rozdělit tuto směs dále na užší frakce podle rozpustnosti při různém pH [1]. V tomto příspěvku byly huminové kyseliny izolované z lignitu těženého v Mi-kulčicích rozpouštěny v tzv. univerzálním pufru ($NaOH-H_3PO_4-CH_3COOH-H_3BO_3$) o různém pH v rozsahu 2 - 12. Přestože již v pufru o počátečním pH = 2,13 se rozpustilo 1,7 % huminových kyselin, rozpustnost pro pufry s počátečním pH = 7,8 nepřekročila 10 %. Maximální rozpustnosti bylo dosaženo při pH = 11,6. Původní vzorek obsahoval 30,2 % popela, všechny frakce extrahované v kyselé oblasti měly zvýšený obsah popela, zatímco frakce získané rozpouštěním v alkalických roztocích měly obsah popela nižší než původní vzorek. Významného snížení obsahu popelovin bylo dosaženo pouze pro počáteční pH = 7,8 (8,5 %). Elementární analýza ukázala, že všechny extrahované frakce mají více kyslíku a méně vodíku než původní vzorek, což ukazuje na zvýšené množství kyslíkatých funkčních skupin odpovědných za rozpustnost huminových kyselin.

Tato práce vznikla s podporou projektů GAČR 104/02/D036 a MSM 0021630501.

[1] Klučáková M., *Humic Substances in Ecosystems 5*, 39-43 (2003).

1Po25

APLIKACE MATEMATICKÉ STATISTIKY V ODHADOVÝCH METODÁCH PRO URČENÍ FYZIKÁLNĚ CHEMICKÝCH VLASTNOSTÍ ČISTÝCH ORGANICKÝCH LÁTEK

[a1]Kolská, Z., [a2]Cihlář, J., [b]Růžička, V., [b]Zábranský, M.

[a1]Katedra chemie, Ústav přírodních věd, Univerzita Jana Evangelisty Purkyně Ústí nad Labem, kolska@pf.ujep.cz;
[a2]Katedra matematiky, Pedagogická fakulta, Univerzita Jana Evangelisty Purkyně Ústí nad Labem, cihlarj@pf.ujep.cz;
[b]Ústav fyzikální chemie, Fakulta chemicko-inženýrská, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, vlastimil.ruzicka@vscht.cz, milan.zabransky@vscht.cz

Odhadové metody pro určení řady fyzikálně chemických vlastností nacházejí uplatnění především tam, kde je nedostatek experimentálních údajů pro průmyslově nebo toxikologicky významné organické látky. Predikční schopnost odhadové metody je určena na základě porovnání získaných odhadnutých hodnot se známými experimentálními údaji nebo s daty získanými jinými, především výpočetními metodami. V řadě publikací jsou tyto výsledky porovnávány např. pomocí průměrných relativních odchylek nebo standardních odchylek bez bližšího popisu celého souboru dat.

Práce se zabývá statistickým porovnáním dat získaných různými odhadovými metodami. Odhadovanými vlastnostmi byly výparné entalpie při teplotách 298,15 K ΔH_V(298,15 K) a při normální teplotě varu $\Delta H_V(T_b)$, výparné entropie při normální teplotě varu $\Delta S_V(T_b)$ a izobarické tepelné kapacity C_p^l při teplotě 298,15 K a při redukovaných teplotách T_r = 0,4; 0,5 a 0,6. Pro odhad všech výše uvedených fyzikálně chemických vlastností byla použita příspěvková metoda Marrera a Ganiho [1]. Pro výpočet příspěvků a následné vyhodnocení odchylky metody byly použity rozsáhlé databáze kriticky zhodnocených experimentálních dat. Predikční schopnost metody Marrera a Ganiho byla porovnána jednak s experimentálními údaji a dále s hodnotami získanými jinými odhadovými metodami. Pro porovnání byly zvoleny následující metody: pro odhad ΔH_V(298,15 K) byly použity příspěvkové metody Ducrose a Chickose; pro odhad $\Delta H_V(T_b)$ a $\Delta S_V(T_b)$ dva empirické vztahy Vetereho a příspěvková metoda Ma a Zhao; k odhadům C_p^l byly použity příspěvkové metody Zábranského a Růžičky, a Chickose.

K porovnání všech získaných výsledků jsme použili aparát matematické statistiky [2]. Nejprve jsme testovali, zda se datové soubory řídí normálním rozdělením. K tomuto testování byl použit Shapirův-Wilkův W test normality. Protože tento test u všech souborů dat potvrdil, že data nepochází z normálního rozdělení, byly dále použity neparametrické statistické testy (Wilcoxonův test a Kolmogorovův-Smirnovův test). Tyto testy poskytují závěry o tom, zda se odhadnuté hodnoty fyzikálně chemických veličin získané jednotlivými použitými metodami statisticky významně liší od dat experimentálních. Dále porovnávají hodnoty relativních odchylek jednotlivých metod a určují, zda některá z metod poskytuje statisticky významně odlišné (nižší nebo vyšší) odchylky odhadu jednotlivých fyzikálně chemických vlastností. Výsledky všech porovnání jsou prezentovány pomocí hodnot různých statistických charakteristik (šikmost a špičatost rozdělení jednotlivých souborů dat, hodnoty mediánů, interkvartilových rozpětí, standardních odchylek, atd.) a pomocí grafických zobrazení (histogramů, krabicových diagramů, atd.). Všechna statistická porovnání byla provedena pomocí programu Statgraphics.

Tato práce byla řešena v rámci výzkumného záměru číslo MSM6046137307.

[1] Marrero, J.; Gani, R., *Fluid Phase Equilib., 183*, 183-208, (2001).
[2] Meloun, M.; Militký, J., *Statistické zpracování experimentálních dat*, Ars Magna, Praha, 1998.

1Po26

HPLC ANALÝZA ALKALOIDŮ ARGEMONOVÉHO OLEJE

Pavel Kosina

Ústav lékařské chemie a biochemie, Lékařská fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Hněvotínská 3, 775 15 Olomouc, Česká republika, e-mail: kosina@tunw.upol.cz

Olej ze semen *Argemone mexicana* (AO) obsahuje sanguinarin, chelerythrin, jejich dihydroderiváty, berberin, koptisin a protopin [1]. Požití AO vyvolává akutní příznaky typické pro oxidační stres (epidemic dropsy syndrom). Tento syndrom je spojován s alkaloidy sanguinarinem a dihydrosanguinarinem. Oba alkaloidy jsou stanovovány v AO buď isokratickou HPLC s UV detekcí [2] nebo HPTLC na silikagelu [3]. V této práci je popsáno stanovení alkaloidů AO metodou HPLC na C_{18} koloně s mobilní fází CH_3OH:CH_3CN:THF:H_2O (21:55:4:20 v/v/v/v) s UV a fluorimetrickou detekcí. V modelové směsi alkaloidů byly nalezeny ostré píky pro sanguinarin, dihydrosanguinarin, dihydrochelerythrin, oxysanguinarin, oxychelerythrin, norsanguinarin, norchelerythrin. Oxysanguinarin a oxychelerythrin byly eluovány v blízkém retenčním čase. Chelerythrin, protopin, koptisin a berberin poskytovaly široké, překrývající se píky. Mez detekce pro sanguinarin byla 10 $\mu g.l^{-1}$, pro dihydrosanguinarin, dihydrochelerythrin a oxysanguinarin 2 až 5 $\mu g.l^{-1}$. V AO (sběr v oblasti Rangareddy, Andhra Pradesh, Indie) byl stanoven dihydrosanguinarin (4972 ≤ 105 $\mu g.l^{-1}$), sanguinarin (48 ≤ 12 $\mu g.l^{-1}$), suma oxysanguinarinu/oxychelerythrinu (88 ≤ 6 $\mu g.l^{-1}$) a dihydrochelerythrin (5 ≤ 1 $\mu g.l^{-1}$). Metoda byla standardizována pro rutinní stanovení alkaloidů ve vzorcích AO.

Autor děkuje prof. Beedu Sashidhar Rao za vzorky AO a MŠMT ČR (MSM 6198959216) za finanční podporu.

[1] Das M., Khanna S.K., *Crit. Rev. Toxicol. 27*, 273-97

(1997).
[2] Husain S., Narsimha R., Rao R.N., J. *Chromatogr. A. 863*, 123-6 (1999).
[3] Ghosh P., Krishna Reddy M.M., Sashidhar R.B, *Food Chem. 91*, 757-64 (2005).

1Po27

DNA-MODIFIED SCREEN-PRINTED CARBON ELECTRODE APPLIED TO THE STUDY OF INTERACTION BETWEEN INORGANIC ARSENIC COMPOUNDS AND DNA AT THE ELECTRODE SURFACE

Renáta Ovádeková[a], Ivan Štepánek[b], Ján Labuda[a]

[a] Department of Analytical Chemistry, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia, e-mail: jan.labuda@stuba.sk
[b] Private Secondary Technical School ELBA, Smetanova 2, 080 01 Prešov, Slovakia

Arsenic is well documented as both a carcinogen and an efficient chemotherapeutic agent. The majority of scientific evidence does not suggest that As is a mutagen in vivo although it has been shown to interact with DNA to cause damage and produce mutations in vitro. Arsenic contamination of drinking water is a public health issue worldwide and, therefore, As is the most widely studied element in drinking water in the last few years.

In our work, a screen-printed electrode based on a carbon paste with the surface modified by double stranded (ds) calf thymus DNA has been prepared and applied to the study effects of arsenic compounds in aqueous solution on changes of integrity of surface attached DNA. Arsenite, arsenate, pantavaled dimethylarsinic acid, as their metabolic product and widely used herbicide as well as phenylarsonic acid and p-arsanilic acid as the representatives of feed additives in some countries have been studied in relatively high concentration corresponding to real contaminated water. Interactions of arsenic compounds with DNA have been detected voltammetrically using the tris(1,10-phenanthroline)cobalt(III) complex $[Co(phen)3]^{3+}$ as a DNA redox indicator. A comparative study using agarose gel electrophoresis was also performed.

This work was supported by the grant agencies VEGA, project No 1/2462/05.

1Po28

ŠTÚDIUM DISOCIAČNÝCH KONŠTÁNT A ROZDEĽOVACÍCH KOEFICIENTOV LÁTOK S POTENCIÁLNYM ÚČINKOM NA ZLEPŠENIE KOGNITÍVNYCH FUNKCIÍ

Anna Lišková[a], Ludmila Křivánková[b], Marie Blešová[a]

[a]Ústav chemických léčiv, Farmaceutická fakulta, Veterinární a farmaceutická univerzita Brno, Palackého 1-3, 612 42 Brno, Česká republika, e-mail: liskovaa@vfu.cz
[b]Ústav analytické chemie Akademie věd České republiky, Veveří 97, 611 42 Brno, Česká republika

U novosyntetizovaných látok, derivátov kyseliny fenoxyoctovej, s potenciálnym účinkom na zlepšenie kognitívnych funkcií boli stanovené hodnoty disociačných konštánt a rozdeľovacích koeficientov so zámerom posúdiť ich schopnosť prechádzať hematoencefalickou bariérou na miesto účinku.

Disociačné konštanty boli experimentálne stanovené 3 metódami a porovnané s výsledkami získanými výpočtovým programom SPARC. Pri stanovení metódou kapilárnej zónovej elektroforézy bola použitá kremenná kapilára s vnútorným povrchom pokrytým vrstvou lineárneho polyakrylamidu za účelom potlačenia eleokroosmotického toku. Keďže výsledky stanovenia mohli byť ovplyvnené interakciou zložiek tlmivých roztokov so študovanými látkami, elektroforetické mobility boli namerané v 3 rôznych elektrolytových systémoch s kon-štantnou iónovou silou a rozsahom pH 2,6 - 5,6. Vplyv experimentálnych podmienok na hodnoty elektroforetic-kých mobilít bol eliminovaný použitím konštantne nabitých mobilitných štandardov, pikrátu a jodičnanu. Hodnoty pK_a boli určené dvoma spôsobmi, nelineárnou regresiou závislosti elektroforetických mobilít na hodnote pH a výpočtom z Henderson-Hasselbachovej rovnice. Pri spektrofometrickom stanovení boli hodnoty pKa získané z nelineárnej regresie závislosti absorbancie látok na hodnote pH mravčanových tlmivých roztokov pri vybranej vlnovej dĺžke. Experimentálne rozdeľovacie koeficienty boli stanovené vytrepávaním v systémoch oktanol - tlmivé roztoky s odstupňovanými hodnotami pH. Zo závislosti rozdeľovacích koeficientov na pH, ktorá je určená rozdeľovacou rovnováhou, boli následne vypočítané aj hodnoty disociačných konštánt.

Práca bola realizovaná za podpory grantu č. 3150-38 VV 355002 Internej grantovej agentúry VFU Brno, grantu č. 203/05/2106 Grantovej agentúry ČR a grantu č. IAA 4031401 Grantovej agentúry AV ČR.

1Po29

CORROSION RESISTANCE OF ELECTROCHEMICALLY SYNTHESIZED POLYPYRROLE COATING ON STAINLESS STEEL SUBSTRATE

E. Machníková [a)], M. Bazzaoui [b)], J. I. Martins [b)], V. Machovič [c)], I. Jiříček [c)]

[a)] J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry, Dolejškova 3, 182 23 Prague 8, Czech republic;
[b)] Department of Chemical Engineering, FEUP, Rua Dr. Roberto Frias s/n, 4200-465, Porto, Portugal;
[c)] Institute of Chemical Technology, Technická 5, 166 28 Prague 6, Czech republic

Among the various conducting polymers, polypyrrole (PPy) is one of the most frequently investigated due to its easy synthesis in organic and aqueous media. Effectively, pyrrole (Py) has low oxidation potential (E_{ox} = 0.7 V vs SCE), high solubility in water (1.2 M) and relatively low cost. Therefore, experimental conditions, when the dissolution rate of working electrode is minimized, are readily achieved during PPy electropolymerization. The morfological and physico-chemical properties of PPy have opened up a large field for many applications [1].

Indeed, it has been demonstrated that conducting polymer coatings can prevent corrosion of iron, zinc, etc. [1,2,3]. However, the protection mechanism is complex and is still under debate.

In this work, the polymerization was carried out by different methods such as potentiodynamic, galvanostatic and potentiostatic method. Homogenous, thick and adherent PPy coating was achieved by galvanostatic technique at j = 5 mA/cm^2 from sodium tartrate aqueous medium. The thickness of the layer was calculated leading to the formula reported in the literature [2]. The corrosion resistance was studied by various techniques: Tafel plot analysis, cyclic polarization, OCP measurements and EIS in 3% NaCl. Infrared and Raman analysis showed that the obtained coating has the same elementary composition and structural properties as those on iron electrodes in aqueous medium [3].

[1] Martins J. I., Reis T. C., Bazzaoui M., Bazzaoui E. A., Martins L.: *Corr. Sci., 46*, 2361-2381, (2004).
[2] Beck F., Michaelis R., Scholten F., Zinger B.: *Electrochim. Acta, 39*, 229-234, (1993).
[3] Bazzaoui M., Martins L., Bazzaoui E. A., Martins J. I.: *Electrochim. Acta, 47*, 2953-2962, (2002).

1Po30

STUDIE VLIVU KATIONTU ROZTOKU HYDROXIDU ALKALICKÉHO KOVU NA ELEKTROCHEMICKOU SYNTÉZU ŽELEZANU

Zuzana Mácová[1], Karel Bouzek[1], Klaus- Michael Jüttner[2]

[1]Ústav anorganické technologie, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká Republika,
e-mail: zuzana.macova@vscht.cz, karel.bouzek@vscht.cz
[2]Karl Winnacker Institut, DECHEMA e.V., Theodor-Heuss-Allee 25, D-60486 Frankfurt am Main, NSR,
juettner@dechema.de

Železany jsou díky neobvyklému oxidačním stavu železa(+VI) a z něj plynoucím silným oxidačním vlastnostem využívány např. při čištění odpadních vod od vysoce toxických látek či ve výrobě tzv. vysokokapacitních baterií (super-iron battery). Tyto vlastnosti ovšem zároveň jejich přípravu a stabilizaci komplikují. Jedním ze způsobů přípravy železanu je anodická oxidace železné elektrody v koncentrovaném roztoku alkalického hydroxidu. Podle [1] klesá při použití čisté železné anody účinnost procesu s dobou elektrolýzy. Za příčinu deaktivace během ustálené anodické polarizace je považována postupná přeměna vrstvy FeOOH pokrývajících povrch anody na Fe_3O_4. Tato vrstva účinně brání dalšímu rozpouštění a oxidaci materiálu z objemu anody.

Předkládaná práce se zaměřila na porovnání vlivu kationtu roztoku hydroxidu alkalického kovu na pasivační vlastnosti vrstev pokrývajících povrch anody z čistého železa. S využitím elektrochemické impedanční spektroskopie byly porovnány roztoky LiOH, NaOH a KOH. Ačkoliv podle [1] probíhá syntéza železanu nejúčinněji ve 14 M NaOH, byla v rámci této práce použita koncentrace 5 M a to s ohledem na nízkou rozpustnost LiOH při laboratorní teplotě.

Povrchové vrstvy vykazovaly ve všech případech dobré ochranné vlastnosti a duplexní strukturu. Nejnižší odpor přenosu náboje byl zjištěn v roztoku KOH. Se zvyšující se teplotou roztoku se pasivační vlastnosti vrstev ve všech studovaných případech snižovaly.

[1] Bouzek K., Roušar I., J. Appl. Electrochem., 27,679, (1997).

1Po31

VLIV POVRCHOVĚ AKTIVNÍCH LÁTEK NA ZETA POTENCIÁL UHLÍKATÝCH MATERIÁLŮ

Roman Maršálek

Ostrava University, Dept. of Chemistry, 30.dubna 22, 70103 Ostrava 1, Czech Republic,
e-mail: roman.marsalek@osu.cz

Hlavním cílem této práce bylo postihnout změny na povrchu uhlíkatých materiálů po přídavku tenzidu a to měřením zeta potenciálu. Bylo použito hnědé, černé a aktivní

uhlí. Zeta potenciál byl měřen ve vodné prostředí a v prostředí tenzidu o koncentraci řádově 0,1mM/l. Jako tenzidy byly vybrány tři typy - kationický, anionický a neionický. Dále byl sledován vliv pH a koncentrace tenzidu na zeta potenciál. Navíc byla proměřena změna zeta potenciálu v čase.

Po přídavku kationického tenzidu došlo k prudkému nárůstu zeta potenciálu, přičemž nejmarkantnější byly tento vzestup u vzorku aktivního uhlí. Po přídavku anionického tenzidu došlo k poklesu zeta potenciálu. Neionický tenzid hodnotu ξ-potenciálu výrazně neovlivnil.

pH ovlivňuje ξ-potenciál zásadně, v našem případě s rostoucím pH ξ-potenciál klesal. Při měření vlivu koncentrace tenzidu se projevil rozdílný efekt. V případě kationického tenzidu došlo k nárůstu ξ-potenciálu již při nízkých koncentracích (0,01mM/l), naopak výraznější pokles hodnoty ξ-potenciálu byl zaznamenán u anionického tenzidu až při vyšších koncentracích (10 mM/l). Hodnota ξ-potenciálu se měnila také s časem a to nejvýrazněji po přídavku kationického tenzidu.

Výsledky této práce ukazují spíše na hydrofobní vazby mezi tenzidem a povrchem uhlí, reakce mezi kationtem tenzidu a zápornými skupinami na povrchu jsou však více než pravděpodobné.

[1] Crawford, R.J., Mainwaring, D.E.: *Fuel 80* (2001) 313 - 320. ISSN: 0016-2361
[2] Basar, C.A., Karagunduz, A., Keskinler, B., Cakici, A.: *Applied Surface Science* 218 (2003) 169 - 174. ISSN: 0169-4332
[3] Taraba, B., Kula, P. Gúcka, M.: *Mezinárodní slovenský a český kalorimetrický seminář*, Pribylina, 2001. ISBN 80-7042-803-1.

1Po32

VYUŽITÍ GC-MS/SPME PŘI ANALÝZE OVOCNÝCH DESTILÁTŮ

Mikulíková Renata[1], Winterová Renata[2], Flodrová Dana[3]

[1] VÚPS a.s., Sladařský ústav Brno, Mostecká 7, 614 00 Brno, mikulikova@brno.beerresearch.cz
[2] VÚPP Praha, Radiová 7, 102 31 Praha, renata.winterova@vupp.cz
[3] VUT v Brně, fakulta chemická, Ústav chemie potravin a biotechnologií, Purkyňova 118, 612 00 Brno

V posledních letech je velmi aktuálním problémem falšování jednodruhových ovocných destilátů. Záměrné falšování jednodruhových destilátů, založené zejména na použití levnějšího druhu ovoce jako částečná náhražka dražšího ovoce a použití jiného než deklarovaného lihu vede nejenom ke klamání spotřebitele, ale má i ekonomický dopad v oblasti celních a daňových poplatků. Nezanedbatelná je pak v této souvislosti také ochrana „poctivých“ výrobců před nekalou konkurencí. Podle požadavků současné legislativy ČR, která je v této oblasti již harmonizována s předpisy EU, může být za ovocný destilát považována pouze lihovina, jejíž etanol pochází výhradně z ovoce a splňuje základní legislativní požadavky (minimální obsah těkavých látek, maximální obsah methanolu a v případě destilátů z peckového ovoce kyanovodíku). Tyto požadavky však sami o sobě pro rozlišní původu použitého ovoce nepostačují.

Cílem naší práce je u vzorků stejného druhu ovocných destilátů identifikovat a kvantifikovat aromatické látky, které by mohly být specifické pro jednotlivé ovocné druhy.

Pro zakoncentrování stopových aromatických látek, které by mohly komplexněji charakterizovat jednotlivé druhově odlišné ovocné destiláty jsme využily mikroextrakce na pevnou fázi (SPME- Solid Phase Micro Extraction). K identifikaci jednotlivých vyextrahovaných komponent jsme použili plynové chromatografie s hmot-nostní detekcí.

Byly identifikovány analyty, které by potenciálně mohly sloužit k charakterizaci jednotlivých druhů ovocných destilátů. Byly stanoveny látky, které se vyskytují ve všech druzích destilátů, látky, které se vyskytují ve většině destilátů a látky, které by bylo možno označit za specifické pro určité druhy destilátů.

Aromatické látky byly identifikovány porovnáním s knihovnou spekter NIST.

[1] Wardencki W., Sowiński P., Curylo J.: J.Chromatogr. A *984*, 89 (2003).
[2] Pino J., Martí M.P., Mestres M., Pérez J., Busto O., Guasch J.: J.Chromatogr. A *954*, 51 (2002).
[3] Ng L.-K.: Anal. Chim. Acta *465*, 309 (2002).

1Po33

DIAGNOSTIC EXAMINATIONS OF CAR PAINTS BY THE Py-GC-MS METHOD FOR FORENSIC PURPOSES

Jakub M. Milczarek[1], Grzegorz Zadora[2], Janina Zięba-Palus[2], Paweł Kościelniak[1,2]

[1]Department of Analytical Chemistry, Jagiellonian University, ul. R. Ingardena 3, 30-060 Kraków, Poland
[2]Institute of Forensic Research, ul. Westerplatte 9, 31-033 Kraków, Poland

Pyrolysis gas chromatography-mass spectrometry (Py-GC-MS) is the analytical method used for the analysis of various samples, including forensic traces.. The major object of this analysis are: paints, synthetic fibers, photocopier toners etc. Py-GC-MS is especially often used as one of the methods for forensic analysis of the paint traces in cases related to the car accidents.

The aim of this research is to adapt the Py-GC-MS system into routine work in a forensic laboratory. As a first step the best conditions have been developed as follows. Samples are exposed to pyrolysis using the CDS Pyroprobe 2000 system at 750 ^{o}C for 20 s. After that pyrolysis the products are separated on a wide-bore fused-silica column HP-5MS (30 m x 0.25 mm x 0,25 Ķm) and detected using mass spectrometer with electron ionization (EI-MS). The chromatographic conditions are as follows: initial temperature 40 ^{o}C for 3 min, 10 ^{o}C/min ramp up to 320 held for 5 min.

Seven model samples (supplied by Akzo Nobel company) of different known composition, similar to composition of typical car resins, were analyzed in above conditions. Pyrograms produced in this experiments were interpreted in such a way that the correlation between major peaks and particular components of analyzed materials were found. The results obtained expressed the original composition of samples and due to this fact they were allowed to be discriminated using the developed Py-GC-MS method. Also a reproducibility of analyses was achieved on a satisfactory level.

1Po34

DENSITY FITTING HARTREE CALCULATIONS IN SOLIDS

Matúš Milko, Štefan Varga, Jozef Noga

Institute of Inorganic Chemistry SAS, Dúbravská cesta 9, SK - 845 36 Bratislava
e-mail: uachmilk@savba.sk

Density fitting approach to the Coulomb problem for infinite systems with translational periodicity was shown to behave correctly by one of us recently [1]. We show that the formulation in reciprocal space and direct space are fully equivalent, leading to a compact and easy-to-evaluate formula. Computational demands scale linearly with the number of unit cells. Moreover, our scheme is independent of the Brillouin zone sampling as all the Coulomb interaction information is contained just in the Γ-point of the reciprocal space. All this offers an extremely fast scheme for Hartree calculations in the solid state.

A way of auxiliary basis set construction which allows a systematic improvement of the accuracy is proposed. Its effectiveness is demonstrated on two model 1D periodic systems, the LiH chain and trans-polyacethylene. We show an accuracy at μE_h level can be achieved with a reasonable size of the auxiliary basis set with computer demands being a negligible fraction of the conventional Hartree calculation.

[1] Š. Varga, *Phys. Rev. B, 71,* 73103, (2005).

1Po35

VZNIK PRIESTOROVÝCH ŠTRUKTÚR V SYSTÉME ASPIRÍN-BROMIČNAN

Daniel Mišicák, Peter Ševčík, Ľubica Adamčíková

Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského,
842 15 Bratislava, Slovenská republika,
e-mail: TUmisicak@fns.uniba.skUT

Fyzikálno-chemické sústavy, ktoré sa nachádzajú ďaleko od rovnováhy, môžu tvoriť štruktúry v čase (napr. chemické oscilácie), alebo štruktúry v priestore (stacionárne vzorky, chemické vlny) [1].

Oxidácia aspirínu bromičnanom v kyslom prostredí prebieha za určitých podmienok oscilačne. Je to nový nekatalyzovaný oscilátor, ktorý sme nedávno popísali [2]. Pozoruhodný je preto, lebo substrátom je najrozšírenejší liek ľudstva so širokým terapeutickým využitím.

Priestorové štruktúry vznikajú interakciou nelineárnej chemickej reakcie s transportnými procesmi a sú jedným z najzaujímavejšícj javov nelineárnej dynamiky. Transportnými procesmi sú napríklad difúzia alebo konvekcia indukovaná hydrodynamickými nestabilitami. V študovanom systéme aspirín - bromičnan sme pozorovali aj vznik priestorových štruktúr. Dvojrozmerné štruktúry sa vyvíjali v jednoduchom otvorenom systéme na Petriho miske. Našli sme optimálne koncentrácie reaktantov a optimálnu hrúbku vrstvy na vytvorenie dobre viditeľných štruktúr. Roztok 1,8 M H_2SO_4; 0,00418 M $NaBrO_3$; 0,0076 M aspirín a 0,002 M ferroín pri teplote 20 ^oC sme miešali 5 sekúnd pri otáčkach 600 rpm a vyliali sme ho na Petriho misku, aby vytvoril 1,5 mm vrstvu. Pôvodne oranžovočervený homogénny roztok sa po ~ 5 minútach začal štrukturalizovať - tvorili sa modré iniciačné centrá pri okraji Petriho misky, zodpovedajúce oxidačným a redukčným zónam. Modré škvrny sa spájali do väčších útvarov a určila sa rýchlosť pohybu čela vlny. Vývoj štruktúry trval za týchto koncentračných podmienok ~ 10 min. Intenzita farby a tvar štruktúry záviseli od koncentrácií reaktantov a od hrúbky vrstvy roztoku. Hrúbka roztoku sa menila od 1,5 mm do 3,2 mm.

Priestorové štruktúry vznikli aj vtedy, ak sa chemikália - kyselina acetylsalicylová p.a. nahradila lekárskym acylpyrínom, tabletkami od firmy Slovakofarma Hlohovec.

Tvoriace sa štruktúry sú reakčno - konvekčnej povahy.

Táto práca vznikla s podporou grantu VEGA MŠ SR č. 1/0050/03.

[1] *Oscillations and traveling waves in chemical systems*; Field R. J., Burger M., Wiley-Interscience: New York, 1985.
[2] Adamčíková Ľ., Mišicák D., Ševčík P.: *React. Kinet. Catal. Lett.*, v tlači.

1Po36

FATE OF THE NITRO ANION RADICAL OF PESTICIDE BIFENOX IN NON-AQUEROS SYSTEMS. DOUBLE-LAYER EFFECTS IN TETRAALKYLAMMONIUM SOLUTIONS

Petra Mořkovská[a]*, Magdaléna Hromadová[a], Lubomír Pospíšil[a], Stefania Giannarelli[b]

*[a] J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry, Electrochemistry, Dolejškova 3, 182 23 Prague, Czech Republic,**
e-mail: petra.morkovska@jh-inst.cas.cz
[b] Department of Analytical Chemistry, University of Pisa, via Risorgimento 35, Pisa, Italy

Bifenox is a herbicide acting on a foliar tissue of broad-leaved weeds. Its free radicals inhibit the photosynthetic

process and cause the cell damage [1]. Free bifenox (methyl-5- (2, 4-dichlorophenoxy)-2-nitrobenzoate) is reduced in aprotic media in two reduction steps [2]. The first heterogeneous electron transfer involves the acceptance of one electron leading to the formation of a relatively stable nitro anion radical that was characterized by EPR spectroscopy. The electrochemically generated radical anion eventually decomposes to two stable products. Intramolecular electron transfer coupled with chemical steps leads in the first case to the cleavage of the carboxymethyl group and the formation of the nitropesticide nitrofen ((2, 4 - dichlorophenyl) (4 - nitrophenyl) ether) and in the second case to a *trans*-esterification process, i.e., an exchange of the methyl group for an alkyl of the supporting electrolyte. The second reduction step is strongly influenced by the nature and concentration of the tetraalkylammonium cation of the supporting electrolyte. The influence of the electrolyte concentration was accounted for by the effect of the electrode double-layer structure on the electron transfer kinetics (Frumkin effect) due to repulsion of the radical anion from a negatively charged electrodelelectrolyte interface.

[1] K. Šiviková, J. Dianovský, *Mutat. Res. 439*, 129 - 135, (1999).
[2] M. Hromadová, P. Mořkovská, L. Pospíšil, S. Giannarelli, *J. Electroanal. Chem.*, (2005), in press.

1Po37

EFFECT OF HOLE SCAVENGER ON THE PHOTOCATALYTIC REDUCTION OF SILVER IONS

Petra Možíšková, Jiří Zita, Michal Veselý

Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Department of Physical and Applied Chemistry, Purkyňova 118, 612 00 Brno, Czech Republic, e-mail: moziskova@fch.vutbr.cz

The photocatalytic reduction of silver ions (Ag^+) to elemental silver (Ag) over UV-illuminated TiO_2 (Degussa P25) was performed using phenol as a hole scavenger. In our work, we investigated the oxidation of phenol in the concurrent reduction of silver ions. We used HPLC to determinate the degradation products. The detection was carried out at 269 nm and we used a mixture of acetonitrile and water (in ratio 40:60) as the mobile phase. During the analysis, we identified several products of the oxidation processes. The concentration of phenol decreased during the reaction to a half in 137 minutes. This reaction was performed for a variety of phenol concentrations. In this work, we have tried to develop a kinetic model of concurrent photochemical reduction of silver ions and photochemical oxidation of phenol. The reactions were performed in immersion well batch reactor and solutions contained silver ions (200 mg per litre), 0.37 g of TiO_2 and phenol (variety of concentration). Total volume of the suspension was 370 cm^{-3}. The concentration of silver was determined by spectrophotometric method at 400 nm.

[1] M.I. Liter, *Applied Catalysis B: Environmental*, *23*, 89, (1999).
[2] D. Chen, A.K. Ray, *Chemical Engineering Science, 56*, 1561, (2001).
[3] V. Brezová, A. Blažková, E. Borošová, M. Čeppan, R. Fiala, *Journal of molecular catalysis A: chemical, 98*, 109, (1995).

1Po38

PEVNÉ AMALGAMOVÉ ELEKTRODY JAKO ALTERNATIVA KE KAPALNÝM RTUŤOVÝM ELEKTRODÁM

Bogdan Yosypchuk, Tomáš Navrátil

Ústav fyzikální chemie Jaroslava Heyrovského AV ČR, Dolejškova 3, 182 23 Praha 8, Česká republika; E-mail: josypcuk@jh-inst.cas.cz, navratil@jh-inst.cas.cz

Pracovní (WE) pevné amalgamové elektrody (MeSAE; Me: Ag, Au, Cu, Bi, Cd aj.) [1-2] byly navrženy v různých modifikacích: neobsahující kapalnou rtuť vyleštěné p-MeSAE, se rtuťovým meniskem (m-MeSAE) nebo se rtuťovým filmem (MF-MeSAE), pastové a kompozitní MeSAE. Nejbližšími analogy kapalných rtuťových elektrod jsou m-AgSAE a MF-AgSAE. Rozsah pracovních potenciálů, potenciály píků a proudy pozadí se na těchto elektrodách prakticky neliší ve srovnání se rtuťovými elektrodami. Na různých typech AgSAE bylo vyzkoušeno stanovení kationtů (Cd(II), Co(II), Cr(III), Cu(II), Fe(III), In(III), Mn(II), Ni(II), Pb(II), Sn(II), Tl(I), Zn(II), As(III)), anionů (IO_3^-, NO_3^-, Cl^-, Br^-, I^-, CNS^-, Cr(VI), Nb(V)) a organických látek (DNA, deoxyoligonukleotidů, adeninu, guaninu, cysteinu, cystinu, SH-látek krevní plazmy, nitrobenzenů, NPAH, azobarviv, protinádorových léčiv aj.).

Referentní elektrody (RefE) na základě stříbrného pevného amalgámu (AgSA) [3] se především liší od klasické kalomelové (SCE) nebo merkurosulfátové elektrody náhradou kapalné rtuti pevným amalgámem. Test dlouhodobé stability potenciálu SCE-AgSA prokázal, že byl potenciál testované RefE velmi blízký potenciálu SCE: E = +1,08 ≤ 0,24 mV. Na základě měření bylo zjištěno, že SCE-AgSA může pro voltametrická měření zcela a bez přepočítávání hodnot potenciálů nahradit SCE.

Navržené elektrody na základě netoxických pevných amalgámů mohou být aplikovány tam, kde je práce se rtutí nežádoucí.

Poděkování projektu MPO ČR 1H-PK/42.

[1] Yosypchuk B., Novotný L. *Electroanalysis, 14 (24)*, 1733-1738 (2002).
[2] Yosypchuk, B., Novotný L. *Crit. Rev. Anal. Chem., 32 (2)*, 141-151 (2002).
[3] Yosypchuk B., Novotný L. *Electroanalysis, 16*, 238-241 (2004).

1Po39

ELECTRODEPOSITION OF METALS ON CLAY MODIFIED ELECTRODES

Zuzana Navrátilová, Lenka Vaculíková

Institute of Geonics, AS CR, Studentská 1768, 708 00 Ostrava, e-mail: navr@ugn.cas.cz

Clay modified carbon paste electrodes have attained a broad utilization in the field of electroanalysis of both metals and organic compounds [1]. However, no attention was given to their ability to act as an electrode support for metal films in anodic stripping voltammetry. Only the report on elimination of the copper-zinc interference at mercury film electrode by a nafion/clay layer was published [2].

Electrodeposition of mercury film was performed on the carbon paste electrode modified with montmorillonite. Mercury film was deposited by both electrodeposition "in situ" and a preliminary electrodeposition. The pre-deposited film of mercury showed to be a suitable for anodic stripping voltammetry. An open-circuit sorption of Cd, Pb and Cu with subsequent anodic stripping voltammetry exhibited higher current responses of metals. Besides the enhanced sensitivity more perfect separation of the current responses during a simultaneous stripping of metals is expected to be achieved by means of the electrode.

A new type of carbon paste electrode modified with mercury microparticles covered with the film of montmorillonite is presented in this work. Both "in situ" and the preliminary deposition was used; influences of deposition potential, time, Hg and clay concentration are discussed.

The first results dealing with an electrode modified with gold film are showed, too.

The work was supported by the Grant Agency of the Czech Republic (Grant No. 205/05/0871).

[1] Navrátilová Z., Kula P., *Electroanalysis, 15*, 837, (2003).
[2] J.-M. Zen, H.-Y. Lin, H.-H. Yang, *Electroanalysis, 13*, 505, (2001).

1Po40

THE EFFECT OF CYCLODEXTRINS ON THE PHYSICO-CHEMICAL PROPERTIES OF THIOACRIDINE DERIVATIVES

Irena Němcová, Eva Caisová, Božena Kafková, Jan Sejbal, Karel Nesměrák

Charles University of Prague, Faculty of Sciences, Department of Analytical Chemistry, 128 40 Prague 2, Albertov 2030; e-mail: inemcova@natur.cuni.cz

Acridine derivatives are active against microbiological and protozoal infections; they have also been synthesised and tested as potential drugs for the reversal of multidrug resistance (by inhibibition of trans-membrane transport). We have studied the properties of derivatives with 9-thioalkyl groups of various length or aryl groups, and with other substituents on the aromatic skeleton.

Cyclodextrin inclusion complexes can be used for the solubilisation and transport of drugs in organism. As they can affect the physico-chemical properties of drugs, we have studied the basic properties of 9-thioacridine derivatives and the effect of α-, β-, and γ- cyclodextrins (differing in a cavity size).

1. *Acid-base properties*. Determined pK_a values were correlated with the values calculated using the Pallas v. 2.0 programme to evaluate the effect of substituents; r = 0.9244 for the correlation. The presence of cyclodextrins has a very small effect on the determined values.
2. *Aggregation*. The free bases of thioacridine derivatives aggregate in aqueous solutions mainly in the dependence on the thio-substituent type. Cyclodextrins suppress the aggregation and form inclusion complexes with the derivative monomers.
3. *Association constants of inclusion complexes*. The determined values vary in the order of 10^1 to 10^4 $[mol\ dm^{-3}]^{-1}$ in dependence both on the structure of thioacridine derivatives and on the cavity size of cyclodextrins.
4. *Structure of inclusion complexes*. According to ^1H NMR study, the alkyl chain of thioacridine derivatives is immersed into the narrower part of cyclodextrin connus.

1Po41

VLIV POVRCHOVĚ AKTIVNÍCH LÁTEK NA PŘÍPRAVU KOLOIDNÍCH ČÁSTIC STŘÍBRA CHEMICKOU REDUKCÍ STŘÍBRNÉ SOLI

Jana Soukupová, Libor Kvítek, Aleš Panáček, Taťjana Nevěčná

Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, tř. Svobody 26, 771 46 Olomouc, Česká Republika, e-mail: kvitek@aix.upol.cz

Koloidní stříbro svými katalytickými účinky zasahuje do mnoha oblastí chemického výzkumu a praxe. Typickou aplikační oblast představuje jeho využití v povrchově zesíleném Ramanově rozptylu (SERS) [1]. Většina aplikací, SERS nevyjímaje, je však závislá na charakteru použitých částic stříbra - zejména jejich velikosti a stavu povrchu. Z pohledu možnosti modifikace povrchových vlastností koloidních částic stříbra představují povrchově aktivní látky (PAL) důležitou skupinu modifikátorů, ovlivňujících interakce na fázovém rozhranní koloidní částice, její povrchový potenciál a tím i vzájemné interakce mezi jednotlivými částicemi i složkami roztoku [2]. V této práci byl studován vliv PAL na velikostní distribuci a zeta potenciál koloidních částic stříbra, připravených chemickou redukcí komplexního iontu $[Ag(NH_3)_2]^+$ glukózou. Použité PAL - SDS, CTAB a Tween představují zástupce tří základních skupin organických PAL, lišících se nábojem povrchově aktivního iontu. Získané výsledky ukazují, že náboj

povrchově aktivního iontu je v případě ionických PAL rozhodující z hlediska zeta potenciálu připravených koloidních částic stříbra. Současně bylo zjištěno, že použité PAL v koncentracích okolo jejich CMC významně zlepšují polydisperzitu připravovaných koloidních částic stříbra bez zásadního vlivu ne jejich výslednou velikost.

Autoři děkují za finanční podporu MŠMT ČR, grant 1M0512.

[1] Garrell, R. L., *Anal. Chem., 61*, A401-A411, (1989).
[2] Kvítek, L., Prášková, M., Pikal, P., Prucek, R., Novotný, R., *Acta Univ. Palacki. Olom., Chemica 40*, 41-47, (2001).

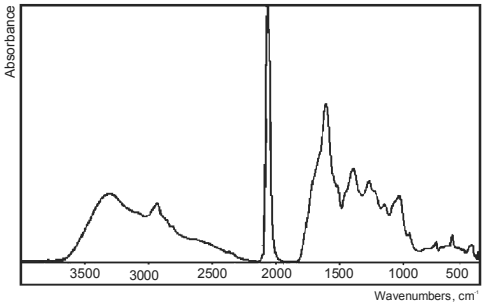


Fig. 1. FTIR spectrum of soil humic acid (podzol, Bohemian Forest) with the band of internal standard (KSCN, peak at 2063 cm^{-1})

1Po42

DETERMINATION OF CARBOXYL GROUPS IN HUMIC ACIDS BY FTIR SPECTROPHOTOMETRY

František Novák[1], Vladimír Machovič[2], Jindřich Poledna[2]

[1] Inst. Soil Biology, Acad. Sci. Czech Rep., Na Sádkách 7, 370 05 České Budějovice, Czech Republic,
[2] NMR laboratory, ICT Praha, Technická 1905, 166 28 Praha 6, Czech Republic,

Carboxyl groups are the main functional group in humic and fulvic acids (HA, FA). Their content influences considerably chemical properties and reactivity of HA. For quantitative carboxyl determination in selected soil FA and HA and coal HA, we used Fourier-Transform IR spectroscopy (FTIR). The samples were prepared and purificated as described elsewhere [1]. To 10 mg of HA or FA dissolved in 1 ml of distilled water, the KSCN was added as the internal standard (2.0 mg.ml^{-1}). After pH adjustment, the solution was applicated on the Si wafer and water was evaporated. FTIR spectra of the resulting HA-film were acquired on the IR spectrometer Nicolet 740 at resolution of 2 cm^{-1}. 128 scans were accumulated to reduce noise. Spectra of humic substances were obtained by subtraction of the Si wafer spectrum (Fig. 1). Bands separation was made in the spectral area of 1830 - 1500 cm^{-1} by the Galactic Peak Solve software by using the combined Gauss-Lorentzian function. In this area, bands at 1766 cm^{-1} (anhydrides), ~1715 cm^{-1} (COOH), ~1670 cm^{-1} (highly conjugated carbonyl groups and amides), ~1600 cm^{-1} (aromatic C=C bond), and ~1530 cm^{-1} (amides and aromatic C=C) were identified. The content of carboxyl groups was determined from the intensity of the band at 1700 cm^{-1}, referenced to the intensity of the KSCN band.

[1] Novák F., Hrabal R., Bartošová I., Kalčík J., *Chem. Listy, 99*, 236-245, (2005).

1Po43

NEW CHROMATOGRAPHIC AND MASS SPECTROMETRIC APPROACH FOR CYTOKININ ANALYSIS

Novák Ondřej, René Lenobel, Doležal Karel, Strnad Miroslav

Laboratory of Growth Regulators, Palacký University and Institute of Experimental Botany ASCR, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc, Czech Republic,
e-mail - novako@prfholnt.upol.cz

Application of new analytical methods makes possible a new direction in plant hormone research. Ultra performance liquid chromatography (UPLC) is new chromatographic technique using high pressure and hybrid particles as column packing. A baseline chromatographic separation of 20 cytokinins (trans/cis-zeatin, dihydrozeatin, isopentenyladenine, benzyladenine, meta/ortho-topoline groups) on reversed-phase column by high-performance liquid chromatography-mass spectrometry (HPLC/MS) was developed [1]. Run time of published cytokinin analysis was 50 minutes. Using UPLC analysis run time was reduced by up to seven times. Retention time stability ranged between 0.1-0.4 % RSD and injection accuracy between 1.5-5.0 % RSD. Combination of quick separation with fast scanning triple quadrupole mass spectrometer was tested.

The method based on capillary liquid chromatography (CapLC) with quadrupole-time of flight mass spectrometry (Q-TOF) was also used for accurate and sensitive identification. Full scan mode and MS-MS analyses gave us a possibility to do more accurately identifications of naturally occurring cytokinins and their metabolites. The accurate masses of the parent ions and their fragments were calculated and used for determination of elementary structure with fidelity 10 ppm and better. Sensitivity and accuracy of the quantitative analysis were comparable with HPLC/MS, shorter dynamic range was replaced by more perfect way of structural determination.

[1] Novák O., Tarkowski P., Lenobel R., Doležal K., Strnad M., *Anal. Chim. Acta, 480*, 207-218 (2003).

1Po44

MODIFIKOVANÁ BRAYOVA - LIEBHAFSKÉHO OSCILAČNÁ REAKCIA ZALOŽENÁ NA OXIDÁCII JODIDOVÝCH IÓNOV PEROXIDOM VODÍKA V KYSLOM PROSTREDÍ

Anna Olexová[a], Marta Mrákavová[a], Milan Melicherčík[b], Ľudovít Treindl[a]

[a]Katedra fyzikálnej chémie, Prírodovedecká fakulta UK, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, e-mail: anna.olexova@fns.uniba.sk, marta.mrakavova@fns.uniba.sk, ludovit.treindl@fns.uniba.sk
[b]Katedra chémie, Fakulta prírodných vied UMB, Tajovského 40, 975 49 Banská Bystrica, e-mail: melicher@fpv.umb.sk

Najstaršia homogénna anorganická oscilačná reakcia je katalytický rozklad peroxidu vodíka jodičnanovými iónmi v kyslom prostredí. Bola publikovaná v roku 1921 a je známa ako Brayova - Liebhafského (BL) reakcia [1].

V jej mechanizme sú zahrnuté dva hlavné kinetické procesy, označované ako proces (A) a proces (B):

$$2IO_3^- + 5H_2O_2 + 2H^+ \rightarrow I_2 + 5O_2 + 6H_2O \qquad (A)$$
$$I_2 + 5H_2O_2 \rightarrow 2IO_3^- + 2H^+ + 4H_2O \qquad (B).$$

Ak je reakčná sústava v oscilačnom stave, striedavo dominuje jeden proces nad druhým.

Výsledkom je katalytický rozklad peroxidu vodíka, proces (C):

$$2H_2O_2 \rightarrow 2H_2O + O_2 \qquad (C)$$

Mechanizmus BL oscilačnej reakcie, najmä procesu (B), nie je doposiaľ celkom objasnený [2,3].

Prínosom práce je nájdenie takých počiatočných reakčných podmienok, za ktorých sa reakčná sústava dostane do oscilačného stavu cez proces (B), čo doposiaľ, za vyše 80 rokov štúdia tejto reakcie, nikto nepozoroval.

Pretože rozpustnosť jódu vo vode je obmedzená, potrebná, dostatočne vysoká počiatočná koncentráciu jódu sa dosiahne oxidáciou jodidových iónov peroxidom vodíka. Reakčná sústava zložená z I^- iónov a H_2O_2 v prostredí $HClO_4$, pri teplote 60°C osciluje. Perióda a amplitúda oscilácií, ako aj dĺžka indukčnej peródy sú funkciou koncentrácie reaktantov a kyseliny. Proces (B) je inhibovaný miešaním. Výsledky experimentov poukazujú na dôležitú úlohu kyslíka v mechanizme procesu (B), čo je v súlade s mechanizmom navrhnutým Treindlom a Noyesom [3].

Ďakujeme Vedeckej grantovej agentúre Ministerstva školstva Slovenskej republiky za finančnú podporu (Grant č. 1/0050/03).

[1] Bray, W. C.: J. Am. Chem. Soc. *43*, 1262, (1921).
[2] Kolar-Anic, L., Schmitz, G.: J. Chem. Soc. Faraday Trans. *88*, 2343, (1992).
[3] Treindl, Ľ., Noyes, R.M.: J. Phys. Chem. *97*, 11354, (1993).

1Po45

CHARAKTERISTIKA A VLASTNOSTI NOVÉHO POTENCIÁLNÍHO LÉČIVA

[1]Radka Opatřilová, [1]Petr Mokrý, [2]Ladislava Bartošová

[1]Ústav chemických léčiv,
[2]Ústav humánní farmakologie a toxikologie, Farmaceutická fakulta Veterinární a farmaceutické univerzity Brno, Palackého 1-3, 612 42 Brno, opatrilovar@vfu.cz

Látka s označením PM 444; hydrochlorid 2-hydroxy(3-terc.butylamino)propyl-4-(butoxykarbonyl) -amino ester benzoové kyseliny; je funkčním analogem aryloxyaminopropanolů. Látka je ze skupiny potenciálních léčiv využívaných v kardiologii pro zvládnutí akutních stavů. Racemát i jeho R- a S- izomery byly připraveny pětistupňovou syntézou a struktura byla ověřena elementární analýzou, IČ, 1H-NMR a 13C-NMR spektroskopií. U látek byly stanoveny základní fyzikální a fyzikálně chemické charakteristiky. Čistota ověřena chromatograficky pomocí TLC na normální fázi. Mobilní fáze cyklo-hexan:ethanol:triethylamin (4:2:1) v/v/v; stacionární fáze Kieselgel® 60 F254 20x20cm. Čistota a stabilita, v časovém intervalu 8 měsíců, pomocí HPLC na koloně ABZ+® C18 250x4,6mm, mobilní fáze acetonitril:voda (60:40) v/v, za laboratorní teploty. K testování antioxidační a antira-dikálové aktivity byly použity metody spektrofotometrické; zhášení stabilního radikálu 2,2-difenyl-1-pikrylhydrazilu, vychytávání oxidu dusnatého tzv. Griessovou reakcí, inhibice chloraminu a titrační: zhášení peroxidu vodíku a bromu ve stavu zrodu. Preparativní tenkovrstvou chromatografií byly za pomoci chirálního selektoru *D,L*-kyseliny mandlové analyticky rozděleny R- a S- izomery, instrumentálně ověřena jejich struktura a následně u racemátu a izomerů testován biologický účinek na laboratorních potkanech kmene Wistar. Při porovnání účinku je patrné, že S-izomer vykazuje větší efekt na izoprenalinem indukovanou tachykardii, a proto by bylo vhodné vyrábět a testovat pouze jeden enantiomer a nezatěžovat organismus racemátem.

Práce byla realizována v rámci řešení post-dok grantu GAČR 203/03/D182.

1Po46

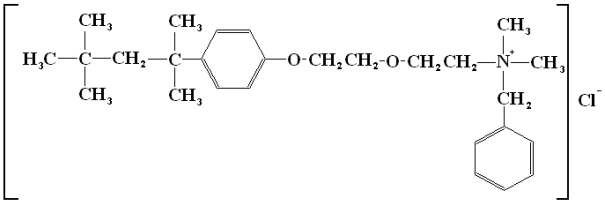
KONDUKTOMETRICKÉ ŠTÚDIUM TERMODYNAMIKY MICELIZÁCIE BENZETÓNIUMCHLORIDU V SÚSTAVÁCH (VODA - KOSOLVENT)

Jarmila Oremusová, Oľga Greksáková

Univerzita Komenského v Bratislave, Farmaceutická fakulta, Katedra fyzikálnej chémie liečiv Odbojárov 10, 832 32 Bratislava, e-mail- oremusova@fpharm.uniba.sk

Práca predstavuje príspevok ku štúdiu termodynamiky micelizácie benzetóniumchloridu (BZCl - schéma) v

binárnych zmesiach voda - alkohol (metylalkohol-MeOH, etylalkohol-EtOH, n-propylalkohol-PrOH) v rôznych hmotnostných koncentráciách (w = 0; 0,1; 0,3; 0,5; 0,7; 0,9 a 1,0) a teplotách 25 - 50 °C. Sumárny vzorec: $C_{27}H_{42}NO_2Cl$



Namerané konduktivitné závislosti vykazujú lineárny rast konduktivity (k) v premicelárnej i postmicelárnej oblasti. Vypočítané CMC rastú nelineárne zvyšovaním teploty i hmotno-stného zlomku alkoholu v sústavách. Stupne disociácie protiiónov (a) rastú takmer lineárne.

Zo závislosti :

$\log CMC_{zmes} = \log CMC_{voda} + K.w$ (1)

kde: w - hmotnostný zlomok alkoholu, CMC_{zmes}, CMC_{voda} - CMC BZCl v zmesiach, resp. vo vode, K - konštanta, ktorej hodnoty závisia od typu alkoholu.

Hodnoty K i CMC sa znižujú v rade: MeOH>EtOH>PrOH>voda. Z výsledkov vyplýva, že denaturácia miciel BZCl závisí hlavne od dielektrickej konštanty a hydrofobicity alhoholov.

Z termodynamických parametrov boli určené: zmena Gibbsovej energie, entalpie a entrópie micelizácie a Gibbsovej energie transferu podľa vzťahov (2-6)

$$\Delta H^0{}_m = -T^2 \frac{\partial(\Delta G^0{}_m / T)}{\partial T} \quad \text{resp. } \Delta H0_m = -RT2(B+2CT) \qquad (3)$$

kde B, C sú parametre polynómu $\ln X_{CMC} = f(T) = A + BT + CT2$ (4)

$$\Delta S^0{}_m = \frac{1}{T}(\Delta H^0{}_m - \Delta G^0{}_m) \qquad (5)$$

$$\Delta G0_t = \Delta G0_{m\,(zmes)} - \Delta G0_{m\,(voda)} \qquad (6)$$

Závery:

Micelizačný proces je spontánny, exotermický a menej favorizuje zmiešané roztoky.

Táto práca vznikla s podporou grantu agentúry VEGA 1/1183/04.

1Po47

POVRCHOVÁ ANALÝZA A HĹBKOVÝ PROFIL CHEMICKY MODIFIKOVANÝCH ZEOLITOV

Jana Oslanská[a], Monika Aranyosiová [a], Eva Chmielewska[a], Dušan Chorvát [b], Dušan Velič[a, b]

[a] *Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, Slovenská republika, e-mail: oslanska@post.sk*
[b] *Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, Slovenská republika*

Zeolity tvoria najväčšiu skupinu hydratovaných hlinitokremičitanov s vymeniteľnými katiónmi alkalických kovov a kovov alkalických zemín [1, 2]. Základnou štruktúrnou jednotkou hlinitokremičitanovej kostry sú tetraédre SiO_4^{-4} a AlO_4^{-5}.Vďaka svojej stavbe vykazujú veľmi dobré selektívne vlastnosti, ktoré tvoria základ pre ich využitie v molekulovej adsorpcii. Pre svoje špecifické sorpčné a iónovýmenné vlastnosti nachádzajú zeolity praktické využitie v rôznych oblastiach vedy a priemyslu a taktiež pri ochrane zložiek životného prostredia. Na zlepšenie sorpčných a katalytických vlastností sa zeolity termicky alebo chemicky aktivujú. Chemicky je možné povrch zeolitov modifikovať naviazaním rôznych funkčných skupín. V závislosti od vlastností a zloženia týchto skupín sa menia vlastnosti zeolitov od hydrofilných až po hydrofóbne.

V práci je študovaný karbonizovaný a hydrofobizovaný zeolit na základe meraní hmotnostných spektier, dvojrozmerných distribúcií rôznych prvkov, molekúl a fragmentov na povrchu zeolitu a na základe hĺbkového profilu karbonizovaného zeolitu. Použila sa technika SIMS (hmotnostná spektrometria sekundárnych iónov). Prítomnosť hydrofóbnej funkčnej skupiny (m/z = 270.3) u chemicky modifikovaného hydrofobizovaného zeolitu potvrdila analýza hmotnostného spektra, v ktorom sa identifikovali píky skupiny $C_{18}H_{40}N^+$ a jej fragmentov, ako aj píky základných prvkov štruktúry zeolitu. Hmotnostné spektrum karbonizovaného zeolitu obsahuje okrem píkov základných prvkov aj fragmenty naadsorbovaného organického materiálu. Pri meraní hĺbkového profilu karbonizovaného zeolitu sa sledovali zmeny intenzity základných prvkov a prvkov indikujúcich skarbonizovanú vrstvu s rastúcou hĺbkou vo vzorke resp. s časom. Hrúbka skarbonizovanej vrstvy je odhadovaná na 1-2 μm.

Tento experiment predstavuje základ pre povrchovú a priestorovú analýzu a modifikáciu zeolitov.

[1] Bowman R. S., Hunter D. B., Sullivan E.J., *Clays and Clay Min. 45*, 42 (1997).
[2] Voltolini M., Artioli G., Morget M., Microp. *Mesop. Mat, 61*, 79 (2003).
[3] Walker A.V., Winograd N., *Appl. Surf. Sci*., 198 (2003).

1Po48

SROVNÁNÍ PRUBĚHU NEKATALYZOVANÉ S_N2 REAKCE ACETÁTOVÉHO IONTU S 1,2-DICHLÓRETHANEM A 1,2-DIBROMETHANEM S REAKCÍ KATALYZOVANOU ENZYMEM HALOGENALKANDEHALOGENÁZOU

Eva Otyepková[1], Michal Otyepka[1], Zbyněk Prokop[2], Michal Boháč[2], Petr Jeřábek[2], Taťjana Nevěčná[1], Jiří Damborský[2]

[1]*Katedra fyzikální chemie, Palackého univerzita, tř. Svobody 26, 771 46 Olomouc, ČR*
[2]*Loschmidtovy laboratoře, Masarykova univerzita v Brně, Kotlářská 2, 611 37 Brno, ČR*

1,2-dichlorethan (DCE) a 1,2-dibromethan (DBE) patří mezi toxické a mutagenní látky, které jsou stejně jako řada dalších halogenovaných uhlovodíků rezistentní k biodegradaci a znečišťují tak životní prostředí [1]. Některé

půdní bakterie mohou díky svým enzymům halogenalkandehalogenázám využívat DCE jako jediný zdroj potravy. Halogenalkandehalogenázy jsou globulární enzymy schopné katalyzovat hydrolytickou dehalogenaci halogenovaných uhlovodíků dvoukrokovým mechanismem, kdy je vazba C-X nahrazena vazbou C-OH. Prvním reakčním krokem je SN2 substituce následovaná bazicky katalyzovanou hydrolýzou vzniklého esteru. Mezi enzymy vykazující nejvyšší katalytickou účinnost s DCE a DBE patří halogenalkandehalogenáza DhlA z *Xanthobacter autotrophicus* GJ10, méně aktivní je dehalogenáza LinB z *Sphingomonas paucimobilis* UT26 [2]. Dosud nevysvětleným fenoménem je stejná účinnost enzymu DhlA s oběma substráty DCE i DBE, zatímco LinB velmi významně preferuje DBE před DCE. Cílem práce je poznání rozdílné dehalogenace DCE a DBE v enzymu LinB. Výsledky kinetických měření rychlosti S_N2 substituce halogenu na DCE a DBE a kvantově chemické výpočty ukazují, že rozdíl v reaktivitě nemůže být vysvětlen pomocí odlišných aktivačních bariér těchto reakcí. Kvantově chemické výpočty a molekulárně dynamické simulace naznačují, že rozdíl je třeba hledat v odlišné solvataci v aktivním místě enzymu.

Poděkování autorů patří MŠMT za finanční podporu (granty MSM6198959216, LC05A57 a MSM0021622413) a MetaCentru za výpočetní čas.

[1] Mabey W., Mill T., *J. Phys. Chem. Ref. Data 7*, 383-415, (1978).
[2] Prokop Z., Monincova M., Chaloupkova R., Klvana M., Nagata Y., Janssen D.B., Damborsky J., *J. Biol. Chem*, *278*, 45094-45100, (2003).

1Po49

SEPARACE TRICYKLICKÝCH ANTIDEPRESIV KAPILÁRNÍ ELEKTROFORÉZOU

Markéta Pechová[1], Vítězslav Maier[1], Jana Horáková[1], Jan Petr[1], Dušan Drahoňovský[2], Juraj Ševčík[1]

[1]Katedra analytické chemie, Univerzita Palackého, Třída Svobody 8, 771 46 Olomouc, Česká Republika, e-mail: m.pechova@email.cz
[2]Institute of Inorganic and Analytical Chemistry, Pérolles, University of Fribourg, CH-1700 Fribourg, Switzwerland.

Tricyklické antidepresiva (TA) jsou strukturně velmi podobné látky s velmi podobným poměrem hmotnosti k náboji. Kapilární zónová elektroforéza je výhodnou technikou pro separaci a stanovení bazických léčiv. Byla studována CZE separace vybraných TA (imipramin, amitriptylin, clomipramin, nortriptylin a desipramin) s využitím carboxymethyl-β-cyklodextrinu v kyselém pracovním elektrolytu (pH 2.5). Při pH 2.5 jsou TA plně protonizovány a disociace carboxymethylových skupin v selektoru je potlačena. Studován byl vliv složení a koncentrace pracovního elektrolytu na průběh separace a vliv dalších CD a jejich derivátů.

Jako alternativní metoda pro separaci TA byla vypracována CZE separace s využitím nově syntetizované kvarterní ammoniové soli 2-hydroxymethyl-1,1-dimethylpyrrolidinium tetrafluoroborátu jako aditiva v kyselém pracovního elektrolytu, který ovlivňuje elektroosmotický tok a umožňuje separaci TA jiným mechanismem oproti cyklodextrinům.

Pro vlastní stanovení TA v moči bylo provedeno srovnání mezi klasicky využívanou L-L extrakcí a cloud point extrakcí s využitím neiontových tenzidů.

Autoři děkují projektu MŠM ČR (MSM 619895216) za finanční podporu práce.

1Po50

STUDIUM ELEKTROCHEMICKÉHO CHOVÁNÍ meso-TETRAKIS(4-SULFOPHENYL) PORFYRINU S VYUŽITÍM POLAROGRAFICKÝCH A VOLTAMETRICKÝCH METOD NA RTUŤOVÝCH ELEKTRODÁCH

Karolina Pecková, Adéla Rumlerová, Jiří Zima, Jiří Barek

UNESCO Laboratoř elektrochemie životního prostředí, Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy, Albertov 6, 128 43 Praha 2, ČR, e-mail: barek@natur.cuni.cz

Porfyriny patří mezi často studované látky. Řada z nich slouží například jako sensitizery tzv. fotodynamické reakce, kde sensitizer zprostředkovává fotooxidaci nejrůznějších látek. Tohoto efektu se využívá například při léčbě nádorových onemocnění či aterosklerózy [1]. Velkou skupinu účinných sensitizerů tvoří deriváty tetrafenylporfyrinu (TPP). Do této skupiny patří i ve vodě rozpustný meso-tetrakis(4-sulfophenyl) porfyrin.

V naší práci jsme se zaměřili na studium elektrochemického chování jeho tetrasodné soli (TPPS4) ve vodných prostředích metodou DC tast polarografie a diferenční pulsní polarografie na rtuťové kapkové elektrodě a diferenční pulsní voltametrie (DPV), adsorpční rozpouštěcí voltametrie (AdSV) a cyklické voltametrie na visící rtuťové kapkové elektrodě (HMDE). Ta prokázala, že látka se redukuje ve dvou stupních, z nichž první má reversibilní charakter. Z analytického hlediska se jako vhodnější jeví pola-rografické techniky: Kalibrační závislosti naměřené v Britton-Robinsonově pufru (pH 10,0) jsou lineární v rozsahu (2 - 30).10^{-6} mol.l^{-1}. Při vyšších koncentracích dochází k jejich zakřivení, což je zřejmě způsobené agregací TPPS4 ve vodném roztoku. Obdobná nelinearita kalibračních závislostí byla pozorována i při spektrofotometrickém stanovení. Při použití metody DPV na HMDE dochází navíc při vyšších koncentracích TPPS4 k jeho adsorpci na povrch elektrody[2], který není v průběhu měření periodicky obnovován. Proto je tato elektroda vhodná spíše pro sta-novení nižších koncentrací - po optimalizaci potenciálu a doby akumulace bylo metodou AdSV na HMDE dosaženo limitu detekce 2.10-7 mol.l-1. Dále byla zkoumána možnost ovlivnit agregaci TPPS4 přídavkem β či γ cyklodextrinu v důsledku tvorby "host-guest" komplexů [3] s cílem využít tento jev k rozšíření lineárního rozsahu kalibrační závislosti pro spektrofotometrické i polarografické či voltmetrické stanovení.

Tento výzkum byl finančně podporován Grantovou agenturou České republiky (projekt 203/03/0182).

[1] Kano K., Fukuda K., Wakami H., Nishiyabu R., Pasternak R.F., *J. Am. Chem. Soc., 122*, 7494 - 7502, (2000).
[2] Shi M., Gao X., Chemistry, *Life Science, & Earth science, 36* (2), 25 - 31, (1993).
[3] Mosinger J., Demié M., Lang K., Kubát P., Wagnerová D.M., *J. Photochem. Photobiol. A, 130*, 13 - 20, (2000).

1Po51

VISKOZIMETRIE ALKALICKÝCH ROZTOKŮ HUMÁTŮ

Miloslav Pekař, Markéta Krbová

Ústav fyzikální a spotřební chemie, Fakulta chemická, Vysoké učení technické v Brně, Purkyňova 118, 612 00 Brno, e-mail: pekar@fch.vutbr.cz

Huminové kyseliny izolované z jihomoravského lignitu byly rozpouštěny v různě koncentrovaných roztocích NaOH. Vzniklé humátové roztoky, o různé koncentraci, byly podrobeny měření koncentrační závislosti kinematické viskozity pomocí kapilárního viskozimetru. Pomocí měření hustot těchto roztoků byly zjištěny dynamické viskozity a určeny hodnoty dynamické viskozity. Viskozity roztoků humátů mírně rostou s koncentrací. Koncentrační závislost viskozit je lineární, proto lze ukázat, že redukovaná viskozita nezávisí na koncentraci, což s poukazem na modifikovanou Einsteinovu rovnici ukazuje na strukturu humátů jako tuhých koulí. Doplňující měření byla provedena s vodným roztokem huminové kyseliny a dále byl sledován vliv přídavku kyseliny na viskozitu tohoto roztoku a roztoků pH-separovaných frakcí huminových kyselin. Tato měření ukazují na zásadní rozdíly v agregačním chování huminových frakcí.

1Po52

MODELOVANIE IÓNOVÉHO KANÁLA DHPR METÓDOU MONTE CARLO

Pavol Petrovič, Ivan Valent

Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, e-mail: ppetrovic@centrum.sk

Excitačno-kontrakčná (EC) väzba v srdcovej bunke je proces, ktorý spája prítok Ca^{2+} iónov cez bunkovú membránu (sarkolemu) prostredníctvom napäťovo závislých DHPR kanálov, indukované uvoľnenie Ca^{2+} iónov (CICR) zo sarkoplazmatického retikula (SR) cez ryanodínové receptory (RyR) a následnú kontrakciu bunky. Cieľom práce bolo vytvoriť počítačový model stochastického vrátkovania DHPR kanála použitím metódy Monte Carlo. Použitím vrátkovacej schémy zo 16 stavmi sme simulovali prúdovú odozvu tvorenú tokom Ca^{2+} iónov cez 10 000 DHPR kanálov na napäťové impulzy vkladané na membránu. Pri kľudovom potenciáli -50 mV je prúd takmer nulový, pretože pravdepodobnosť prechodu kanálov do otvorených stavov je zanedbateľná. Pri napäťovom impulze -20 mV už dochádza k otvoreniu asi 1,2 % kanálov, čo predstavuje vápnikový prúd 28 pA. Pri ďalšej depolarizácii membrány na -10 mV a +10 mV dostávame prúd 62 pA resp. 80 pA. Pri akomkoľvek ďalšom zvyšovaní membránového potenciálu sa neotvorí viac ako 5 % kanálov. Najväčšiu prúdovú odozvu sme dostali pri +5 mV, hodnota unitárneho prúdu je v tomto prípade ~0,2 pA. Pri simulácii možno pozorovať istú nábehovú fázu potrebnú na dosiahnutie limitnej hodnoty prúdu (10 až 15 ms). Po skončení excitačného impulzu sa kanály veľmi rýchlo vracajú do zatvorených stavov, pričom relaxačný čas je podstatne kratší ako nábehová fáza, prakticky nezávisí na vloženom potenciály a trvá ~3 ms. Vytvorená metodika a vrátkovací model DHPR kanála tvorí základ pre ďalšie modelovanie zložitejších fyziologických procesov v bunke srdcového svalu ako je CICR a EC-väzba.

Táto práca vznikla s podporou grantu VEGA 1/0068/03.

1Po53

FTIR STUDY OF GAMMA-IRRADIATED CIS-1,4-POLYISOPRENE

Júlia Pigošová[a], Erik Klein[a], Zuzana Cibulková[a], Vladimír Lukeš[b]

[a]*Department of Physical Chemistry, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava, Slovak Republic*
[b]*Department of Chemical Physics, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava, Slovak Republic*

The effect of γ-irradiation on the structure and oxidation of cis-1,4-polyisoprene is investigated by ATR-FTIR technique. This method provides the valuable information about the types of present oxidation products as well as about intramolecular cyclization and chain scission reactions. The formation of ketones, alcohols and/or ethers and hydroperoxides is apparent already at small doses of γ-radiation and it increases with the exposure time significantly. At the highest dose (309 kGy) decrease in intensity of C=O stretching mode of ketones (1717 cm^{-1}) was observed while the overall area of the band remained the same as for 188 kGy dose. The shoulders which appeared at 1740 cm^{-1} and 1772 cm^{-1} can be assigned to C=O stretching frequency of esters and five-membered-ring lactones, respectively. Higher doses of γ-radiation also cause the formation of two relatively strong bands in the region of conjugated double bonds. These can origin from aromatic products or cycloenes with one double bond formed by cyclization and chain scission processes.

1Po54

VYUŽITIE ELIMINAČNEJ VOLTAMPÉROMETRIE (EVLS) PRI POPISE MECHANIZMU ROZPÚŠŤANIA PRÁŠKOVÉHO ŽELEZA

Ľubomír Pikna[1], Ladislav Lux[1], Libuše Trnková[2]

(1) Katedra chémie, Hutnícka fakulta TU Košice, Letná 9, 042 00 Košice, Slovenská republika
Lubomir.Pikna@tuke.sk
(2) Katedra teoretické a fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity, Kotlářská 2, 611 37 Brno, Česká republika

Elektrochemické štúdium tuhých látok v práškovej forme môže poskytnúť informácie o vlastnostiach daného materiálu, ktoré by nebolo možné získať pri použití kompaktných materiálov. Pri charakterizácii elektrochemických vlastností práškového Fe boli využité elektrochemické metódy ako cyklická voltampérometria, chronoampérometria, pulzová chronoampérometria, chronopotenciometria [1], či normálna pulzná voltampérometria. [2]. Pri popise mechanizmu anodického rozpúšťania Fe prášku môže byť veľmi nápomocná eliminačná voltampérometria (Elimination voltammetry with linear scan -EVLS).

Pri eliminačnej voltampérometrii sa pre elimináciu jedných a zachovanie druhých vybraných dielčích prúdov využíva ich rozdielna závislosť na rýchlosti polarizácie elektródy. EVLS je schopná eliminovať vybraný čiastkový prúd (kapacitný, difúzny, kinetický) z nameraných prúdovonapäťových kriviek získaných v CV alebo LSV vytvorením novej prúdovej funkcie v podobe lineárnej kombinácie celkových prúdov meraných pri rôznych rýchlostiach polarizácie [3]. Okrem použitia EVLS pri roztokovej analýze [3] sa táto metóda uplatnila aj pri charakterizácii vlastností vylúčeného povlaku niklu na tuhej parafínom impregnovanej grafitovej elektróde [4].

Táto práca sa zaoberá vplyvom pH, koncentrácie chloridov a prítomnosti, resp. absencie vzdušného kyslíka, v octanovom elektrolyte na proces anodickej oxidácie Fe prášku imobilizovaného na povrchu parafínom impregnovanej grafitovej elektródy (PIGE). Prítomnosť chloridu draselného v octanovom elektrolyte sa prejavil na samotných voltampérometrických krivách, ako aj na krivkách po eliminácii jednotlivých prúdov, z čoho vyplýva zmena v mechanizme anodického rozpúšťania Fe prášku. Zatiaľ čo octanové ióny spôsobujú pasiváciu povrchu Fe, chloridové ióny pôsobia ako aktivátory korózie, vyvolávajú bodové napadnutie postupne sa tvoriacej pasivačnej vrstvičky a tým podporujú rozpúšťanie. Keďže s hodnotou pH elektrolytu priamo súvisí koncentrácia OH^-, pri pH > 4 dochádza k rýchlejšej pasivácii povrchu Fe prášku, ako to možno pozorovať na voltampérometrických krivkách.

Príspevok vznikol s podporou GA SR VEGA č. 1/1108/04 a agentúry APVT grant č. 20-009404 a výskumného projektu INCHEMBIOL (MSM 0021622412) poskytnutý od MŠMT ČR.

[1] Gálová M., Grygar T., Pikna Ľ., Lux L., *Chem. Anal. (Warsaw)*, 48:293-303, (2003).
[2] Lux L., Gálová M., Heželová M., Markušová K., *J. Solid State Electrochem., 3*:288-292, (1999).
[3] Trnková L., Dračka O., *J. Electroanal. Chem., 413*:123-129, (1996).
[4] Oriňáková R., Trnková L., Gálová M., Šupicová M., *Electrochim. Acta, 49*:3587-3594, (2004).

1Po55

SPATIO-TEMPORAL PATTERNS OF ELECTRONIC EXCITATIONS IN 2D ORDERED SYSTEMS OF CHROMOPHORES

Tibor Pálszegi, Josef Rychlý, Alexander Búcsi

Department of Chemical Physics, FCHPT, STU, Radlinského 981237 Bratislava, tibor.palszegi@stuba.sk
Polymer Institute, Slovak Academy of Science, Dúbravská cesta 9, 84236 Bratislava, upoljory@savba.sk

The possibility of the formation of spatio-temporal electronic excitation distributions on 2D ordered systems of chromophores has been studied analytically and numerically. Two different systems of parabolic differential equations, representing an ordered 2D set of chromophores coupled to a source of laser light and to a thermal reservoir have been defined. Both set consist of donor chromophores absorbing light and transfering reversible electronic excitation to the nearest-neighbor donors. Then, (i) in the first model the donors are coupled to acceptors electronically and by short molecular chains. In one of two conformations of the short chains the acceptors can transform the excitations into thermal energy due to effective irreversible donor-acceptor energy transfer in that conformation, having higher conformational energy as the second one. In the second model (ii) donors can relax inramolecularly (e.g. by internal conversion) increasing the thermal energy. In both models the heat is conducted diffusively in the chromophoric system and part of the absorbed light is emitted. By linear stability analysis conditions for parameter sets, corresponding to unstable and excitation (fluorescence) pattern forming solutions has been specified. Further, by numerical simulation on square grids (Euler method) time evolution of the electronic excitation and temperature distributions has been calculated.

1Po56

STUDIUM REDUKOVANÉHO, OXIDOVANÉHO A NITROSO GLUTATHIONU POMOCÍ CYKLICKÉ VOLTAMETRIE

Jan Víteček[1], Jitka Petrlová[2], Jiří Petřek[1], Vojtěch Adam[2,3], David Potěšil[2,3], Ladislav Havel[1], Radka Mikelová[2], Libuše Trnková[4], René Kizek[2]

[1]Ústav biologie rostlin
[2]Ústav chemie a biochemie, Mendelova zemědělská a lesnická fakulta v Brně, Zemědělská 1, 613 00 Brno
[3]Katedra Analytické chemie a 4katedra Teoretické a fyzikální chemie, Masarykova univerzita, Kotlářská 2, 611 37 Brno; e-mail: kizek@sci.muni.cz

Transport těžkých kovů v organismech je pravděpodobně řízen celou řadou proteinů a peptidů. Tyto proteiny a peptidy regulují koncentraci těžkých kovů a tak udržují stálost vnitřního prostředí. Zvýšená koncentrace esenciálních těžkých kovů, jako je zinek, měď a železo, nebo kovů toxických (kadmium, olovo a arsen), vyvolá v organismech zvýšenou syntézu nízkomolekulárních proteinů a peptidů. Nejjednodušší sloučeninou, která se detoxikace účastní, je glutathion (GSH, Glu-Cys-Gly). Nedávno bylo objeveno, že GSH je spojen s metabolismem oxidu dusnatého (NO). NO je jedna z nejvýznamnějších signálních molekul u živočichů, ale i u řady rostlin. Oxid dusnatý se může vázat na sulfhydrylovou skupinu GSH a vzniká tak S-nitrosoglutathion (GSNO). Navíc z molekuly GSNO se NO může uvolňovat za specifických podmínek. V naší práci bylo studováno základní elektrochemické chování GSH, oxidovaného glutathionu (GSSG) a GSNO pomocí cyklické voltametrie. Nejdříve jsme studovali vliv rychlosti polarizace a přítomnosti redukčního činidla (Tris(2-carboxyethyl)phosphine). Byly získány striktně lineární kalibrační závislosti (R^2 > 0,995), R.S.D. okolo 5 %. Vypočtené limity detekce (3 S/N) byly GSH - 9 nM, GSSG - 4 nM a GSNO 20 nM. Dále byl v naší práci sledován rozklad GSNO katalyzovaný přídavky Cu(II) a Fe(II) detekcí uvolnujícího se NO s využitím NO selektivní elektrody z uhlíkového vlákna.

Tato práce byla podporována granty Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (projekt 1P05ME757 a INCHEMBIOL 0021622412) a projektem Grantové agentury České republiky No. 525/04/P132. Účast na konferenci 57. zjazd chemických spoločností byla financována Českou chemickou společností.

[1] Kizek R., Vacek J., Trnkova L., Jelen F., *Bioelectrochemistry, 63*, 19-24, (2004).
[2] Moncada S., Palmer R. M. J., Higgs E. A., P*harmacol. Rev., 43*, 109-142, (1991).
[3] Pfeiffer S., Schrammel A., Schmidt K., Mayer B., *Anal. Biochem., 258*, 68-73, (1998).

1Po57

GC-MS ANALÝZA PLYNNÝCH LÁTEK VZNIKAJÍCÍCH PŘI TPD PYRIDINU Z POVRCHU MĚDĚNÉHO KATALYZÁTORU SE SILIKÁTOVÝM NOSIČEM

Lenka Přibylová, Bohumír Dvořák

Ústav organické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28, Praha 6, lenka.pribylova@vscht.cz

Teplotně programovaná desorpce (TPD) pyridinu, popř. jiných teplotně stabilních bází, je hojně užívanou metodou k charakterizaci kyselosti tuhých sorbentů. Princip metody spočívá v rovnovážné chemisorpci báze na povrchová, kyselá centra sorbentu a v následné kvantitativní analýze TPD spektra této báze nebo jejích rozkladných produktů. Množství a kvalita látek desorbujících a obsažených v proudu nosného plynu je určována nejčastěji universálním TC-, ale také specifickými FI-, IR- nebo MS-detektory.

Tento příspěvek informuje o výsledcích analýzy TPD spekter pyridinu (Py), získaných kombinací GC-separace složek a následné detekce eluujících složek TC- a MS-detektorem.

Analýzou TPD spekter pyridinu, naměřených FI- a TC-detektorem, bylo zjištěno, že získaný záznam z TCD je superpozicí spekter pyridinu, vody a oxidu uhličitého. Nežádoucí vliv kontaminace Py-spektra vodou a CO_2 byl eliminován sorpcí na tuhém NaOH. Výskyt vysokoteplotního desorpčního píku pouze ve spektru snímaném TC-detektorem přispěl k odhalení silně kyselých center na povrchu silikátového nosiče katalyzátoru. Užití vhodného GC-sorbentu umožnilo separaci a následnou MS-identifikaci rozkladných produktů pyridinu. Bylo prokázáno, že pyridin, desorbující z povrchu silně kyselých center při teplotách t > 500°C, je rozkládán až na N_2 a CO. Rozklad pyridinu na N_2 a H_2 při Py-TPD z povrchu Pd nosičového katalyzátoru pozorovali a popsali ve své práci také Skotak a spol.[1]

[1] Skotak M., Karpiński Z., *Polish J. Chem., 78*, 1953-1959, (2004).

1Po58

SUPRAMOLEKULOVÉ HOST-GUEST KOMPLEXY NA BÁZE CYKLODEXTRÍN-DIFENYLHEXATRIÉN

L. Rábara[a], M. Aranyosiová[a,b], P. Chandoga[a], I. Bugár[b], D. Velič[a,b], D. Chorvát[b]

[a] *Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava,*
[b] *Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, e-mail: velic@ilc.sk*

V tomto príspevku sa diskutuje o fenoméne samoposkladania vo forme host-guest inkluzívnych komplexov so snahou vytvoriť samoposkladanú supramolekulovú vrstvu na povrchu [1]. Tieto povrchové nanoštruktúry sú zaujímavé a značne priťahujú pozornosť v oblasti ako molekulárna biochémia alebo tvorba nanoštruktúr. Prvým krokom v tomto smere je charakterizácia host-guest komplexov. Študované host-guest komplexy sú na báze cyklodextrínu ako hostiteľa a difenylhexatriénu (DPH) ako hosťovskej molekuly inkluzívne viazanej v kavite hostiteľa. Na komplexy sa použil β-cyklodextrín ($C_{42}H_{70}O_{35}$) a DPH vo forme 1,6-difenyl-1,3,5-hexatriénu ($C_{18}H_{16}$). Takéto supramolekulové štruktúry sa tvoria nielen v komplexačnom pomere 1:1, ale aj vo vyšších komplexačných pomeroch vo forme nanodrôtu [2].

Rozličné rozpúšťadlá pre DPH a β-cyklodextrín sa charakterizovali pomocou statickej fluorescenčnej spektroskopie. Vlnové dĺžky maxím fluorescencie DPH s trojitou vibračnou štruktúrou sú 400, 423 a 451 nm, 402, 424 a 450 nm, 404, 426 a 452 nm, 402, 425 a 450 nm namerané v etanole, metanole, acetóne a n-hexáne. Dôkaz o tvorbe supramolekulových host-guest komplexov je založený na rozdielnych relatívnych intenzitách píkov vibračnej štruktúry. Zaujímavosťou sú pozorované maximá vlnových dĺžok vo vodnom prostredí pri 438, 468 a 494 nm s dvojitým píkom.

Hmotnostná spektrometria sekundárnych iónov so separáciou podľa doby letu (time of flight secondary ions mass spektrometry, Tof-SIMS) podporila tvorbu supramolekulových komplexov vo forme hmotnostného spektra. Komplex vzniká vo vodnom roztoku cyklodextrínu (nasýtený roztok, koncentrácia 10^{-2} M), hoci DPH má vo vode extrémne nízku rozpustnosť (10^{-7} M). Je jasnou výzvou vyskúšať detekciu slabo viazaných komplexov s veľmi nízkou koncentráciou použitím mechanizmu kolízií. Molekulové ióny cyklodextrínu s m/Z 1133 sa pozorovali v spektre s negatívnou polaritou pravdepodobne po odtrhnutí jedného atómu vodíka. Kationizované molekuly cyklodextrínu so sodíkom alebo draslíkom sú v spektre s pozitívnou polaritou pri m/Z 1157 resp. 1173. Prítomnosť DPH vo vzorke sa zistila pri m/Z 232 ako pozitívneho molekulového iónu. Celý supramolekulový komplex cyklodextrínu a DPH sa pozoroval v kationizovanej forme s draslíkom pri m/Z 1405. V negatívnej polarite spektra sa našiel vyšší poriadok komplexácie v pomere 2:1 pri m/Z 2500. Diskutované sú aj zistené píky zodpovedajúce iným vyšším komplexačným pomerom, vplyv substrátu, iné komplexy s rozpúšťadlom, nečistotami a tvorba nanodrôtu.

Predkladané štúdium reprezentuje základ charakterizácie supramolekulových povrchových nanoštruktúrových vrstiev.

Táto práca vznikla za podpory grantov VEGA 1/0216/03 a APVT 298.

[1] Velic D., Koehler G.; *Chem. Phys. Lett. 371*, 483 (2003).
[2] Li G., McGown L.B.; *Science 264*, 249 (1994).

1Po59

ANALYSIS OF PREBIOTICS IN SAMPLES FROM INTESTINE

Katarína Reiffová[a], Jana Podolonovičová[a], Radomíra Nemcová[b], Dominika Škrabeková[a]

[a]*University of P.J. Šafárik, Faculty of Natural Sciences, Institute of Chemistry Sciences, Moyzesova 11, 040 01 Košice, Slovakia, reiffova@kosice.upjs.sk*
[b]*Laboratory of Gnotobiology and Disease of Young, University of Veterinary Medicine, Komenského 73, 040 01 Košice, Slovakia*

Application of two chromatographic methods of thin-layer chromatography (TLC) with densitometric detection and thin-layer chromatography with flame-ionization detection (TLC-FID) in the analysis of prebiotics as feed additives in biological samples is presented in this work. The samples were from different regions of the intestinal tract of monogastric animals to which a commercially available dietetic products containing fructooligosaccharides Raftifeed and polysaccharide Maltodextrin has been added into feed. TLC-FID was performed on Chromarods S III (stationary phase) with ethyl acetate-formic acid-water as mobile phase [1]. Thin-layer chromatography was performed on glass-backed precoated silica gel plates impregnated with sodium acetate. The plates were developed with butanol-ethanol-water as mobile phase [2]. The visualisation of separated compounds on chromatograms was performed with diphenylamine-aniline-phosphoric acid as primary detection reagent. Densitometric resolution of chromatograms was performed at 370 nm. Pretreatment of the biological samples was minimal. The samples were diluted by hot water (1:1, v/v); then a few seconds mixed up in enclosed test tubes. The supernatant was used for analysis. Compared to HPLC and GC, planar chromatography has advantages like simple sample preparation, possibility of simultaneous analysis of many samples (resulting in low cost per sample), the disposable stationary phase that allows analysis of crude samples and the use of static and sequential detection methods for identification and confirmation without time constraints [3].

This work has been supported by grant VEGA 1/0445/03 and MVTS 047 CZE.

[1] R.G. Ackman, C.A. McLeod, A. Banerjee, *J.Planar Chromatogr., 3*, 450, (1990).
[2] I. Kerepesi, M. Tóth, L. Boross, *J. Agric Food Chem., 44*, 3235-3239, (1996).
[3] C.F. Poole, *J. Chromatogr. A, 856*, 399-427, (1997)

1Po60

STANOVENÍ NĚKTERÝCH TĚŽKÝCH KOVŮ V ROSTLINNÉM MATERIÁLU METODOU PRŮTOKOVÉ ROZPOUŠTĚCÍ CHRONOPOTENCIOMETRIE

Jaroslav Rejnek

Katedra chemie, Ústav přírodních věd, Univerzita J. E. Purkyně v Ústí n.L., ul. České mládeže 8, 400 96 Ústí nad Labem, e-mail: rejnekj@pf.ujep.cz

Elektroanalytické metody prochází po určité stagnaci prudkým rozvojem. Rozvíjeny jsou zejména voltametrické a coulometrické metody[1]. Jejich analytické aplikace nacházejí uplatnění ve výzkumu, průmyslu i monitoringu životního prostředí. Proto je žádoucí věnovat těmto metodám výraznou pozornost.

Cílem této práce bylo optimalizovat podmínky měření kadmia, olova a mědi v rostlinných materiálech rozpouštěcí chronopotenciometrií. S teoretickými základy a využitím této metody se může čtenář seznámit v řadě publikací[1-3].

Před vlastním stanovením byl analyzovaný vzorek referenčního rostlinného materiálu NIST 1515 mineralizován postupem na suché cestě. Popel byl rozpuštěn v koncentrované HCl čistoty superpure a upraven tak, aby výsledná konc. kyseliny byla 0,1 mol.dm^{-3}. Pro měření bylo připraveno 5 paralelních mineralizátů, u každého z nich bylo provedeno 10 měření. Stejným způsobem byl zpracován i slepý vzorek. Měření obsahu olova, kadmia a mědi v mineralizátech prováděno metodou galvanostatické rozpouštěcí chronopotenciometrie, a pro možnosti porovnání také metodou atomové absorpční spektrometrie. Hodnoty zjištěné pro kadmium byly ve většině případů nižší než hodnoty předpokládané. Toto platí zejména pro nižší koncentrace. Pro olovo platí opačné konstatování. Naměřené hodnoty jsou ve většině případů vyšší než předpokládané. Měření obsahu mědi přineslo vyšší než předpokládané hodnoty u koncentračního rozsahu kalibračních roztoků, nižší u vzorků modelových.

[1] Kissinger, P.T.; Heineman, W.R.: *Laboratory Techniques in Electroanalytical Chemistry.* Marcel Dekker, Inc., New York, Basel, Hong kong 1996.
[2] Beinrohr, E.; Dzurov, J.; Annus, J.; Broekaert, J.A.C.: *Fres. J. Anal. Chem 362*, 201, 1998.
[3] Beinrohr, E.; Cakrt, M.; Dzurov, J.; Kottas, P.; Kozaková E.: F*res. J. Anal. Chem. 356,* 253, 1996.

1Po61

VALIDATION OF THE FAAS METHOD FOR THE DETERMINATION OF Cd, Cu, Pb, AND Zn IN EXTRACTS OF THE GRAVITATION DUST SEDIMENT FRACTIONATION ANALYSIS

Dagmar Remeteiová[a], Emília Sminčáková[a], Daniela Mackových[b],Henrieta Šoltýsová[b]

[a]*Technical University, Faculty of Metallurgy, Department of Chemistry, Letná 9, 042 00 Košice, Slovak Republic, e-mail: dagmar.remeteiova@tuke.sk*
[b]*Geological Survey of Slovak Republic, Geoanalytical Laboratories,Markušovská cesta 1, 052 40 Spišská Nová Ves, Slovak Republic*

The fractionation is a process of classification of element forms from a sample according to their various physical (e.g., size, solubility) or chemical (e.g., bonding, reactivity) properties [1]. One of the methods of the fractionation analysis is the single-step extraction. The extraction enables to isolate various physical-chemical forms of the element from the gravitation dust sediment samples. For the determination of relatively low element contents in extracts it is possible to use atomic absorption spectrometry methods. This work is focused on the validation of the atomic absorption spectrometry with flame atomisation for determination of Cd, Cu, Pb, and Zn in extracts of 1 mol.dm^{-3} NH_4NO_3, 0.05 mol.dm^{-3} Na_2EDTA, and 2M HNO_3. For the evaluation were chosen validation characteristics like limit of detection, limit of quantitation, precision/repeatability, robustness, and calculated uncertainties of the results of the measurements with respect to the extraction procedures and to the determination of selected elements in the extracts by the FAAS method.

[1] Templeton D. M., Ariese F., Cornelis R., Danielsson L. G., Muntau H., Leeuwen H. P. van, Łobiński R., *Guidelines for Terms Related to Chemical Speciation and Fractionation of Elements. Definitions, Structural Aspects, and Methological Approaches, IUPAC Recommendations 2000, Pure Appl. Chem., Vol. 72, No. 8,* 1453-1470, (2000).

1Po62

ELEKTRODEPOZÍCIA KOVOV NA GRAFITOVEJ ELEKTRÓDE ŠTUDOVANÁ POMOCOU ELIMINAČNEJ VOLTAMETRIE

Roland Rozik, Lenka Zerzánková, Libuše Trnková

Katedra teoretické a fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Kotlářská 2, 611 37 Brno, ČR, e-mail: rozikr@yahoo.com

Karbónové materiály (prášok, vlákna, siete a iné) si našli široké uplatnenie vo výrobnom priemysle (automobilový, letecký) a aj v odvetviach prírodných vied (chémia, fyzika) ako elektródy. Aj v elektrochémii sa im dostalo

pozornosti vedľa často používanej a preferovanej ortuťovej elektródy, z dôvodu ľahkej manipulácie, časovej nenáročnosti meraní a priemernej reprodukovateľnosti meraného prúdového signálu. Grafitové elektródy vynikajú z pomedzi ostatných elektród, možnosťou modifikácie buď to povrchu (filmové elektródy) či celého objemu (pastové elektródy) čím sa selektivita týchto elektród rapídne zvýši.

Tento príspevok je zameraný na elektrochemické správanie sa rôznych kovov (Ni, Co, Cu) na parafínom impregnovanej grafitovej elektróde (PIGE) v často užívaných elektrolytoch (NaCl, Na_2SO_4) a za prítomnosti rôznych aditív (H_3BO_3, adenín). Štúdium elektrochemického rozhrania grafit/elektrolyt bolo realizované pomocou bežne dostupných volametrických metód ako je cyklická voltametria (CV) či voltametria s lineárnou polarizáciou (LSV) a taktiež pomocou eliminačnej voltametrie s lineárnou polarizáciou (EVLS). EVLS je nová metóda, ktorá nám poskytuje nový pohľad na problematiku v oblasti elektrochemického správania sa študovaných systémov na elektrickom polarizovanom rozhraní elektróda/elektrolyt. Umožňuje eliminovať čiastkové prúdy (kinetický, kapacitný a difúzny prúd) prítomné v celkovej prúdovej odozve systému a tým prispieť k odhaleniu minoritného procesu (napr. sorpciu, nukleáciu) v procese majoritnom.

Táto práca bola finančne podporovaná projektom INCHEMBIOL (MSM 0021622412), projektom AIP č.046, č. 750/2005 a č. 963/2005 MŠMT.

1Po63

OPTIMIZATION OF THE TANDEM METHOD IN THE EMISSION SPECTROMETRY

Silvia Ružičková, Jolana Bajuszová, Ladislav Koller, Mikuláš Matherny

Department of Chemistry, Faculty of Metallurgy, Technical University of Košice, Letná 9, SK - 042 00 Košice, Slovak Republic, e-mail: silvia.ruzickova@tuke.sk

The effect of the current intensity on the evaporation process in a direct current (DC) arc discharge has been studied in the frame of the optimization a technique for direct analysis of solid samples. This new technique is based on evaporation of solid sample by high current discharge between carrier and counter electrodes in a cell for aerosol production and the follow excitation of aerosol in a separated plasma source has been studied [1]. A water cooled cell for production of vapours of solid samples is connected with the Marinković plasma source [2]. Argon is used as a transport gas. Emitted radiation from the plasma source is transmited through an optical fibre to the multichannel simultaneous LECO-750 spectrometer. Obtained signals are integrated and by SPECTRUMAT software evaluated.

The experiments have been carried out with the 1% model mixtures consisted from element oxides and graphite powder of the chosen elements: Al, B, Ca, Cr, Cu, Mg, Mn, Ni, Si, and V. The evaporation was investigated at 10, 15, and 20 A of DC arc and evaporation curves of spectral line intensity have been measured. Efficiency of the evaporation has been evaluated by the determination of the half ($t_{50\%}$) and total ($t_{100\%}$) combustion. Generally, raising of the current intensity leads to the reduction of half-time and total evaporation time as well. The average time reduction is 5.75 s. Experiments confirmed that exposition time longer than 40-45 s is not effective because it causes only background intensity increasing.

[1] S. Ružičková, E. Jankovská, L. Koller, *Proceedings of 4th EFS and XVth Slovak Spectroscopic Conference*, The High Tatras, (2000).

[2] M. Marinković, V. G. Antonijević, *Spectrochim. Acta Part B 35*, 129, (1980).

1Po64

INVESTIGATION OF THE NEW PHYSICOCHEMICAL PARAMETER IN QSAR STUDIES OF ANTIMYCOTIC COMPOUNDS

Anna Sroka, Joanna Sakowicz, Mariusz Barczak

Department of Planar Chromatography, Faculty of Chemistry M.Curie-Skłodowska University M.Curie-Skłodowska Sq., 20-031Lublin, Poland email: annasroka@tlen.pl

Since the development of the quantitative structure - activity relationship (QSAR) studies, it has became apparent that the biological activity of a given group of chemicals is in many instances predominantly a function of their hydrophobic behaviour.

The chromatographic estimation of the hydrophobic character is usually based on retention factors in pure water ($\log k_w$). In our paper we proposed the use for this purpose a new physicochemical parameter A_s, which is connected with intermolecular interactions in chromatographic systems.

In this work HPTLC method was used in QSAR studies for 2,4-hihydroxythiobenzanilide derivatives modifier in N-aromatic moiety, which have high antimycotic activity.

The chromatographic experiments were carried out on the plates HPTLC: RP-8F_{254s}, RP-18F_{254s}, RP-18WF_{254s} (Merck) with water - organic modifier (acetone and methanol) system as the mobile phases.

There were studied the correlation between obtained A_s parameters and fungicidal activity of examined agents towards dermatophytes: *Epidermophyton floccosum I, Trichophyton galline, Trichophyton rubrum, Trichophyton mentagrophytes.*

The good parabolic relationship between antifungal activity and A_s values obtained for examined agents allowed to propose the using of parameter A_s as a new physicochemical parameter in the quantitative structure - activity relationship studies.

1Po65

STANOVENÍ MOLYBDENU METODAMI ATOMOVÉ SPEKTROMETRIE

Jana Seidlerová, Martina Nováčková

Vysokoškolský ústav chemie materiálů VŠB - TUO, 17. listopadu, 733 08 Ostrava Poruba, e-mail: jana.seidlerova@vsb.cz, martina.novackova@vsb.cz

Ke stanovení prvkového složení pevných vzorků se s výhodou využívá XRFS. Výsledky poskytované touto metodou u některých prvků, jako je např. Mo, nejsou v přítomnosti vysokých koncentrací matričních prvků (např. Fe aj.) přesné a jsou zatíženy velkou chybou. Je proto vhodnější ke stanovení zejména nízkých koncentrací takových prvků použít metodu AAS - GF nebo pro vyšší koncentrace metodu AES - ICP. Přítomnost matričních prvků však i u těchto metod stanovení ruší. Příkladem materiálu s takto komplikovanou matricí je elektrárenský popílek a frikční kompozit. Pro potřeby řešení níže uvedených projektů byla vypracována a ověřena metoda stanovení Mo po totálním rozkladu vzorku s jeho následnou separací, která vychází z postupu publikovaného v práci [1]. Ověření postupu pro nízké koncentrace (desítky mg/kg) bylo provedeno na referenčních materiálech elektrárenských popílků. Mo se z roztoku stanovil metodou AAS - GF (přístroj UNICAM 989 QZ). Uvedený postup rozkladu vzorku byl dále aplikován na frikční kompozity, ve kterých se koncentrace Mo pohybovala v intervalu od mg/kg po jednotky %. Ke stanovení byla u tohoto materiálu použita metoda AAS - GF i AES - ICP (přístroj JY 24). Ze statistického zhodnocení výsledků vyplývá, že postup poskytuje správné, dobře reprodukovatelné výsledky, které nejsou ovlivněny různorodostí matrice.

Autorky děkují MŠMT za poskytnuté prostředky na projekty MSM 619 891 0016 a 101/03/1403.

[1] Krakovská E., Kuss H.M.: *Rozklady v analytickej chemii*. Vydavateľstvo VIENALA, Košice 2001. ISBN 80-88922-48-8, EAN 9788088922483.

1Po66

ANALYSES OF NATURAL ANTIOXIDANTS IN BREVERAGES USING RP-HPLC

Veronika Škeříková[a], Pavel Jandera[a], Tomáš Hájek[a], Lucie Řehová[b], Lucie Baldriánová[a], Martina Lasáková[a], Georgios Theodoridis[c], Andromahi Tegai[c]

[a] *Department of Analytical Chemistry, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Nám. Čs. Legií 565, 532 10 Pardubice, Czech Republic*
[b]*Instutute af Macromolecular Chemistry, Czech Academy of Sciences, Heyrovského nám. 2, 162 06 Prague 6, Czech Republic*
[c]*Laboratori of Analytical Chemistry, Aristotele University of Thessaloniki, 541 24 Thessaloniki, Greece*

The natural antioxidants are transferred to beverages during the production from different parts of used plants and have a great beneficial effect on health of consumers. Their structures are diverse and hence may be classified into several classes (benzoic acid derivatives, cinnamic acid derivatives, flavonols, glycosides).

We developed a method for simultaneous analysis of 32 flavonoid and phenolic antioxidants using gradient HPLC methods with sensitive multi-channel electrochemical (coulometric). Electrochemical CoulArray detector and UV-detector were used for detection. The detection limits and the linearity range of the CoulArray detector (gradient elution) were compared with the UV-detector (isocratic conditions). The detection limits appear significantly higher with using the UV-detector than with the CoulArray detector for most natural antioxidants. Sensitivity of CoulArray is higher, but is thepends on pH of mobile phase; therefore pre-concentration of compounds is not necessary. However, some compounds are contained in beverages in concentrations below the UV detection limits and is necessary to pre-concentrate or isolated this compounds from real samples.

Frequent method for pre-concentration and/or isolation of compounds is solid phase extraction (SPE). Nowadays, new materials for isolation of compounds from matrices are introduced. Very promising are molecular imprinted polymers (MIP). This sorbent is supposed to be highly selective for only one substance, which was imprinted in it during the polymerisation.

Optimised methods were used for the analyses of antioxidants the real samples (beer, wine, tea, herbs extracts) and average amount of single antioxidants was calculated on the base of calibration curves. Significant differences were found between the occurrence and average concentrations of the identified antioxidants in the individual samples.

1Po67

VÝPOČET INTERAKČNÍCH ENERGIÍ α-ŠROUBOVIC PROTEINOVÉHO INHIBITORU P18-INK4C

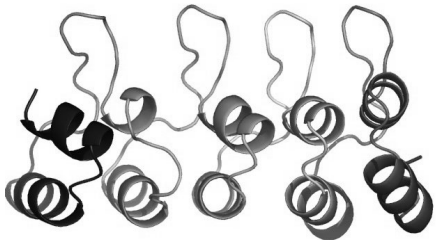
Petr Sklenovský, Michal Otyepka, Pavel Hobza

Katedra fyzikální chemie a Centrum pro biomolekuly a komplexní molekulární systémy, Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci, Tř. Svobody 26, 771 46 Olomouc, milion@c-box.cz, otyepka@aix.upol.cz

Prostorová struktura proteinů je z velké míry určena interakcemi nekovalentního charakteru, z nichž nejvýznamnější roli mají elektrostatická a disperzní interakce. Přesný popis velikosti disperzní interakce mezi komponenty malého mezimolekulového komplexu je v současnosti možný na základě přesných metod kvantové chemie, tedy metod zahrnujících elektronovou korelaci a v limitě nekonečnou bázi. Výpočet interakce větších celků, jako například proteinových struktur, je však touto cestou značně

zkomplikován vysokým počtem atomů ve sledovaném systému. Použitelnost zmíněných metod kvantové chemie je proto v tak obrovských mezimolekulových komplexech naprosto vyloučena a je nutno sáhnout buď po zjednodušených kvantově chemických metodách, nebo zvolit empirický potenciál.

Sledovaným systémem byl proteinový inhibitor cyklin-dependentní kinázy P18-Ink4C (PDB kód 1IHB), který je složen z 10 α-šroubovic (viz obrázek). Cílem naší práce bylo kvantifikovat interakční energie mezi jednotlivými šroubovicemi použitím empirického potenciálu *Cornellové* a kol. parm99 [1] a DFT metody s aproximativním započtením disperzní energie (DFTB-D). DFTB-D metoda byla použita pro výpočet velikosti příspěvku disperzní energie mezi interagujícími šroubovicemi. Tato aproximativní DFT metoda je schopna poskytnout velmi dobrý popis [2] velikosti disperzní energie. Vzhledem k tomu, že celková interakční energie mezi a-šroubovicemi inhibitoru cyklin-dependentní kinázy je značně velká a záporná (~ -400 kcal/mol), lze tedy uvažovat o nezanedbatelném vlivu entalpického členu při skládání terciární struktury tohoto inhibitoru. Toto zjištění lze s velkou pravděpodobností zobecnit na celou skupinu bílkovin.



Tato práce vznikla za podpory grantu LC05A57 (MŠMT ČR).

[1] Cornell W.D., Cieplak P., Bayly C.I., Gould I.R., Merz, Jr. K.M., Ferguson D.M., Spellmeyer D.C., Fox T., Caldwell J.W. a Kollman P.A., *J. Am. Chem. Soc., 117*, 5179-5197, (1995).
[2] Elstner M., Hobza P., Frauenheim T., Suhai S., Kaxiras E., *J. Chem. Phys., 114, 5149-5155*, (2001).

1Po68

SUPRAMOLECULAR SECONDARY SOURCES OF SINGLET OXYGEN

L. Slavětínská, J. Mosinger and J. Sejbal

Faculty of Science, Charles University in Prague, 2030 Hlavova, Prague 128 43 Czech Republic, mosinger@natur.cuni.cz

Water soluble anthracene (2,6-disulfonato-9,10-diphenylanthracene, 2,7-disulfonato-9,10-diphenylanthracene) and naphthalene (sodium 3-(4-methyl-1-naphthyl)-propionate) derivatives are excellent singlet oxygen acceptors. The reaction is based on 4+2 cycloaddition with $^1O_2$ producing different stable, water soluble endoperoxides. Thermal decomposition of endoperoxides at higher temperature leads to production of oxygen, partly in its singlet state via backward reaction. Singlet oxygen acceptors and corresponding endoperoxides form host-guest complexes with native (CDs) and 2-hydroxypropylated cyclodextrins (hpCDs). The binding constants (10^2 - 10^4 M^{-1}) and binding modes depend on the cavity size, the functionalization of primary face of CDs and position of sulfo groups on 9,10-dihenylanthracene and methyl/propionate groups on the naphthalene. Binding modes was determined by 2D-NMR experiments. The thermal stability of endoperoxides is increased by host-guest interaction with CDs/hpCDs. The study demonstrate the utilization of supramolecular anthracene and naphthalene endoperoxides as secondary sources of singlet oxygen in aqueous solutions.

1Po69

TERMOGRAVIMETRICKÉ STUDIUM NÍZKOTEPLOTNÍ OXIDACE UHLÍ

Václav Slovák

Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita v Ostravě, 30. dubna 22, Ostrava, e-mail: vaclav.slovak@osu.cz

Práce je zaměřena na studium nízkoteplotní (do 150°C) interakce uhlí s kyslíkem pomocí neizotermní termogravimetrie. Cílem práce bylo navrhnout metodiku termogravimetrického studia oxidace uhlí, která by umožnila sledování samotné interakce uhlí s kyslíkem bez rušivých vlivů způsobených ztrátou vlhkosti nebo desorpcí plynů obsažených v experimentální atmosféře a vyhodnotit některé parametry tohoto procesu (aktivační energie, kritická teplota samovznícení).

Navržená metoda (metoda autokorekce) je založena na opakovaní termogravimetrického experimentu v inertní atmosféře (dusík) na stále stejném vzorku uhlí do té doby, než dva po sobě následující experimenty neposkytnou shodné TG křivky. Následně je vzorek podroben stejnému termogravimetrickému experimentu v oxidační atmosféře (80% kyslík, 20% dusík). TG křivka získaná v oxidační atmosféře je pak korigována odečtením poslední TG křivky získané v inertu.

Výsledky získané metodou autokorekce byly porovnány s výsledky získanými pomocí jednodušší a časově méně náročné metody korekce jiným vzorkem. Ta je založena na korekci TG křivky naměřené v oxidačním prostředí odečtením křivky získané za stejných experimentálních podmínek v inertní atmosféře na jiném vzorku stejného uhlí.

Porovnání křivek získaných opakovanými experimenty s použitím obou metod korekce ukázalo, že metodou autokorekce lze dosáhnout lepší reprodukovatelnosti naměřených TG křivek interakce uhlí s kyslíkem. Ke stejnému závěru vedlo i porovnání výsledků obou metod při určení kritické teploty samovznícení a aktivačních energií interakce uhlí-kyslík. Na druhou stranu rozdíly v parametrech zjištěných oběma metodami mohou indikovat vliv zbytků vlhkosti na oxidaci uhlí.

Tato práce byla vznikla za podpory Grantové agentury ČR, číslo projektu 105/03/0538.

1Po70

POČÍTAČOVÁ REKONŠTRUKCIA KONFORMÁCIE CHROMOZÓMOV

Eva Smreková, Ivan Valent

Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prírodovedecká fakulta UK, Mlynská dolina Bratislava 842 15, e-mail: gorkanna@yahoo.com

Za predpokladu známej sekvencie báz možno určiť priestorovú konformáciu chromozómu metódou CCC (Capturing Chromosome Conformation, [1]). Na základe pravdepodobnosti interakcie (cross-linking) dvojíc vybraných bodov objektu je vytvorená distančná tabuľka. Ďalším matematickým spracovaním tejto matice - odstránením šumu rozkladom na vlastné hodnoty a vlastné vektory a následným Choleského rozkladom bezšumovej matice je možné určiť súradnice bodov objektu. Cieľom práce bolo vytvoriť príslušný softvér a na konkrétnych objektoch overiť spoľahlivosť použitých matematických metód najmä pri zvyšujúcom sa šume v distančnej matici. Skúmali sme štyri objekty: kružnicu (2D), deformovanú kružnicu, závitnicu a chromozóm III (všetky 3D). Zostavili sme distančnú maticu každého objektu a zaťažili ju umelými chybami s použitím generátora náhodných čísiel s normálnym rozdelením. Po odstránení šumu sme Choleského rozkladom získali súradnice objektu a novú distačnú manicu sme štatisticky vyhodnotili vzhľadom k pôvodnej matici.

Z analýzy vyplýva, že daná matematická metóda je vyhovujúca. Zachováva mieru nepresností na vstupe a nedochádza k významnej akumulácii chýb. Pre šum < 5 % nedochádza k výraznej zmene tvaru rekonštruovaného objektu, dochádza však k jeho miernej rotácii v priestore.

[1] Dekker J., Rippe K., Dekker M., Kleckner N., *Science 295*, 1306 (2002).

1Po71

ELECTROCHEMISTRY OF 3,5-DIHALOGENO-4-HYDROXYBENZONITRILES (IOXYNIL AND BROMOXYNIL) IN NON-AQUEOUS MEDIA

R. Sokolová, E. Machníková, M. Hromadová, L. Pospíšil

J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry, Dolejškova 3, 182 23 Pague 8, Czech republic

The pesticides ioxynil (3,5-diiodo-4-hydroxybenzonitrile) and bromoxynil (3,5-dibromo-4-hydroxybenzonitrile) act as photosynthetic electron transfer inhibitors [1] and their photochemical transformation has been studied recently [2]. In this work we present analysis of the electrochemical reduction mechanism of both pesticides in dimethylsulfoxide using the electrochemical methods combined with GC/MS and LC/MS identification of the electrolytic products. Two irreversible reduction waves were observed for both ioxynil (at - 0.85 V and - 1.25 V against the Ag/AgCl/1M LiCl reference electrode) and bromoxynil (at - 0.95 V and - 1.35 V) compounds, respectively. The electron transfer reaction is coupled to the subsequent chemical reaction. The main decomposition pathways include the cleavage of iodine and bromine atoms, respectively. Differences in the decomposition mechanism of ioxynil and bromoxynil are discussed.

[1] C.D.S. Tomlin, *The Pesticide Manual*, 12th ed., British Crop Protection Council, Farnham, UK, pp. 110 and 548, (2000).

[2] M. A. Malouki, A. Zertal, B, Lavédrine, T. Sehili, P. Boule, *J. Photochem. & Photobiol.* A: Chemistry, 168, 15, (2004).

1Po72

THIN-LAYER ELECTROCHROMATOGRAPHY

Anna Sroka, Joanna Sakowicz, Mariusz Barczak

Department of Planar Chromatography, Faculty of Chemistry
M.Curie-Skłodowska University, M.Curie-Skłodowska Sq. , 20-031 Lublin, Poland
e-mail: annasroka@tlen.pl

Electrochromatography is one of the most perspective chromatographic method. It connected an advantages of electrophoresis and liquid chromatography. In the last decade electrochromatography stayed popular method in capillary mode. Electrochromatographic process is more complicated than chromatography one. Except typical interactions existing in liquid chromatography system two phenomena as electroosmosis and electrophoresis can exist in electrochromatography system. Planar Electrochromatography was created in answer on the one of the disadvantages of TLC - mobile phase velocity is not constant during development of chromatogram and is not constant. Because transport of mobile phase in electrochromatography is via electroosmotic flow, mobile phase velocity is constant during development of chromatogram and can be regulated by voltage of electric field. It is one of the advantages of PEC. In planar mode to this time electrochromatography is rather seldom used and investigation on that method are an initial stage. Only a few authors published data about separation by electrochromatography process. Results obtained to this time in capillary electrochromatography allow to suppose that elecrochromatography can be a very promising method. In order to better know the electrochromatographic process some fundamental investigation are necessary. In the presented investigations are presented:

- how electric field influences on the surface of the stationary phase
- how electric field influences on the retention values in different chromatographic systems
- how electric field influences in the resolution and efficiency of the chromatographic system.
- how electric field influenced on the mobile phase velocity during development of the chromatogram.

Answers on that questions allow better know electrochromatography process and application of ETLC method in many laboratory.

1Po73

ANTIOXIDANT CAPACITY OF FOODS CHARACTERISED BY MEANS OF 1,1-DIPHENYL-2-PICRYLHYDRAZYL (DPPH)

Vlasta Brezová, Andrej Staško, Dana Dvoranová

Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology,
Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, SK-812 37, Slovak Republic
e-mail: vlasta.brezova@stuba.sk

The food quality is increasingly considered to be a dominant parameter in the prevention of diseases. A decisive role is assigned to the antioxidants, mainly to vitamins, carotenoids, flavonoids and phenolic compounds. Various tests are used to determine the antioxidant capacities of food and its components. One traditional and still very frequently used is the test by means of DPPH free radical source. To DPPH solution with a well-known concentration, the food solution or an extract of its components are added and the decrease of DPPH concentration is followed indicating the antioxidant action. Various relative concentrations of DPPH and food components are used and different reaction intervals are considered in the evaluations. One of the basic problems is the solubility of DPPH. To be close to the living systems, water as solvent is desired, but DPPH is poorly soluble in water, consequently mixed solvents have to be employed.

Our investigations presently carried out are oriented on the methodological aspects of DPPH application using EPR spectroscopy. Some representative antioxidants (quercetin, gallic acid, trolox, tocopherol, ascorbic acid, resveratrol, β-carotene) were chosen and their antioxidant activity was followed for 10 minutes at various ratios DPPH:antioxidant in ethanol or in 1:1 = water:ethanol solutions. The molar equivalent points are approximated to zero decreased DPPH concentration mainly characterized with a sharp equivalent point. The highest antioxidant capacity showed quercetin and gallic acid (DPPH:antioxidant = 4:1), followed by trolox, tocopherol, and ascorbic acid (2:1) and the lowest one resveratrol (1:1). Using the mixed solvent ethanol-water, at the water ratios over 75 %, the hyperfine structure of EPR spectrum changed to a single line characteristic of solid state, and oxidant activity of DPPH significantly decreased.

This work was supported by the Science and Technology Assistance Agency under the contract No.APVT-20-005702.

1Po74

STUDIUM KRITICKÝCH MICELÁRNÍCH KONCENTRACÍ A JEJICH ZMĚN V ZÁVISLOSTI NA SLOŽENÍ ROZTOKU

H. Strnadová[a], L. Kvítek, T. Nevěčná

[a]*Katedra fyzikální chemie PřF UP Olomouc,*
Tř. Svobody 8, Olomouc, 771 46
e-mail: hana.strnadova@atlas.cz

Samosdružovací schopnost do micel u povrchově aktivních látek (PAL) vychází z amfifilního uspořádání jejich molekul. Kritickým parametrem tohoto procesu je tzv. kritická micelární koncentrace (CMC), kterou lze experimentálně získat řadou fyzikálně chemických metod. Dostupnost hodnot CMC PAL v literatuře, bývá zpravidla omezena na vodné prostředí a bez přídavku dalších aditiv do roztoku PAL.

Hodnoty CMC v různém prostředí jsou důležité nejen pro průmyslové aplikace, ale také pro chemický výzkum. Analytická separační metoda, micelární elektrokinetická kapilární chromatografie (MECC), využívá micely pro dělení neutrálních i nabitých molekul. Takové systémy tvoří pufrované vodné roztoky PAL o různé iontové síle, obsahující polymérní molekuly a zkoumaný analyt.

Experimentální metody prezentované práce byly vybrány s ohledem na jejich vypovídací schopnost o změnách fyzikálně chemických vlastností v tenké skleněné kapiláře: viskozimetrie, tensiometrie, konduktometrie a turbidimetrie. Měřené PAL byly zastoupeny ze tří základních kategorií - anionické (SDS), kationické (CTAB) a neionické (Tritony, Genapol).

Výsledné hodnoty CMC, agregačních čísel a dalších termodynamických veličin jsou v dobré shodě s dostupnými literárními údaji pro vodné prostředí. V pufrovaných roztocích dochází k posunu CMC k nižším hodnotám, díky změnám iontové síly. Přídavek polyoxyethylenglykolů do roztoků PAL vede ke zlepšení experimentálních podmínek pro měření CMC ionických PAL viskozimetrickou kapilární metodou.

Nové údaje o zmíněných veličinách pro modifikovaná prostředí naznačují cestu ke zlepšení a zefektivnění experimentálních podmínek pro analytická měření.

1Po75

VPLYV FULERÉNU NA MATRICOVÝ EFEKT V HMOTNOSTNEJ SPEKTROMETRII SEKUNDÁRNYCH IÓNOV

M. Stupavská[a], M. Aranyosiová[a,b], D. Velič[a,b], D. Chorvát[b]

[a] *Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava,*
[b] *Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, stupavska@pobox.sk*

Hmotnostná spektrometria sekundárnych iónov (secondary ions mass spectrometry, SIMS) je metóda na

analýzu chemického zloženia materiálov. SIMS analýza sa používa predovšetkým v polovodičovom priemysle, ale už sa rozvíjajú aplikácie v oblasti biochémie a analýzy polymérov.

Princíp analýzy povrchu vzorky spočíva v jej bombardovaní lúčom primárnych iónov s vysokou energiou. Tieto ióny prenikajú pod povrch materiálu a ich kinetická energia sa časticami substrátu prenáša až k povrchu, kde nastáva vyrážanie častíc z povrchovej vrstvy. Tieto sekundárne ióny sú extrahované a separácia je založená na meraní doby letu od ich vyrazenia zo vzorky po dopad na detektor. Takáto technika sa označuje ako doba letu (time of flight, Tof).

Iónový výťažok, teda množstvo atómov, molekúl a fragmentov, ktoré sú pri emisii z povrchu ionizované, je závislý od viacerých faktorov, ako ionizačný potenciál častíc alebo druh primárnych iónov. Najväčší vplyv na vznik a druh ionizovaných emitovaných častíc má matricový efekt, čo je v podstate závislosť týchto faktorov od chemického zloženia prostredia, z ktorého sú tieto ióny vyrážané.

V experimente je študovaný β-cyklodextrín, pričom cieľom experimentu je určiť akým spôsobom a v akej miere sa prejaví matricový efekt, ak je cyklodextrín nanesený na striebro a na fulerén, čím sa modifikuje chemické prostredie vzorky. Cieľom je modifikovať toto prostredie takým spôsobom, aby sa zvýšila emisia celej ionizovanej molekuly a jej klastrov.[1].

Fulerény predstavujú zaujímavú sférickú štruktúru. Sú to molekuly pozostávajúce z atómov uhlíka, ktoré vytvárajú dutú klietku. Ide o skrátený ikosaeder (dvadsaťsten), kde atómy uhlíka sú v rohu každého šesťuholníka, pričom väzby sa tiahnu po celom jeho okraji. Štruktúra týchto molekúl môže byť guľovitá (buckyballs) alebo valcovitá (buckytubes). Najvýznamejšie fulerény sú C_{50}, C_{60} a C_{70}. Rozmer molekuly sa pohybuje okolo 0,7 nm v závislosti od počtu naviazaných atómov uhlíka. Uhlíkové väzby zabezpečujú vysokú stabilitu fulerénov, teda nie sú veľmi reaktívne, určité zvýšenie reaktivity možno dosiahnuť atakovaním aktívnych centier na ich povrchu. Vysoká stabilita týchto látok spôsobuje aj ich nerozpustnosť pre väčšinu rozpúšťadiel.

V predkladanom príspevku je popísaný vplyv fulerénu na matricový efekt a zvýšenie výťažku molekulového iónu β-cyklodextrínu.

Táto práca vznikla za podpory grantov VEGA 1/0216/03 a APVT 298.

[1] Briggs D.; *Surface analysis of polymers by XPS and static SIMS*, Cambridge University Press 1998, s. 93-96.

1Po76

IN-SITU STUDIUM ADSORPCE INHIBITORU RAMANOVOU SPEKTROSKOPIÍ

Suchý O., Marek J., Novotná M., Macák J

VŠCHT, FTOP ústav energetiky, Technická 5, Praha 6, 16628, ondrej.suchy@centrum.cz

Předkládaná práce je spektroskopickou studií adsorpce inhibitoru na povrchu kovu. Byla měřena Ramanovova spektra látek vylučovaných na povrchu zkušební elektrody in-situ ve vodném prostředí s obsahem SO_4^{2-},Cl^- v přítomnosti benzotriazolu a tolyltriazolu. Byla získána elektrochemická data, metodou impedanční spektroskopie, která byla vyhodnocena ve spojitosti s Ramanovými spektry. Byly sledovány látky vylučované na povrchu elektrod při různém napětí ve směru katodické i anodické části polarizační křivky. Byl zjištěn vznik koordinační vazby mezi dusíkem tolyltriazolového kruhu a kovem zkušební elektrody v závislosti na vloženém napětí. Současně bylo sledováno vylučování Cl^-, příp. SO_4^{2-} na povrchu elektrod.

Práce vznikla s podporou projektu MSM 6046137304.

1Po77

VYUŽITÍ IMUNOAFINITNÍ CHROMATOGRAFIE PRO STANOVENÍ BRASSINOSTEROIDŮ V ROSTLINNÉM MATERIÁLU

J. Swaczynová[1], E. Hauserová[1], L. Kohout[2], M. Strnad[1]

[1] Laboratoř růstových regulátorů PřF UP & ÚEB AV ČR, Šlechtitelů 11, Olomouc, 78371, swaczynova@hotmail.com
[2] Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, Flemingovo náměstí 2, 16610 Praha 6

Brasinosteroidy (Brs) jsou rostlinné hormony steroidní povahy, s širokým spektrem účinky. Mají vliv na růst rostlin, diferenciaci orgánů, regulují velikost a počet semen a podílejí se na adaptaci rostlin vůči stresovým faktorům (sucho, teplota atd.). Byly vyizolovány z nižších i vyšších rostlin.

Stanovení a kvantifikace těchto látek je poměrně obtížná, protože se v rostlinách vyskytují ve velmi malých množstvích (0,1 ppm v pylu řepky). Předpokládáme, že ke zvýšení citlivosti stanovení Brs by mělo přispět spojení imunoafinitní chromatografie s HPLC/MS. Z tohoto důvodu byly připraveny polyklonální protilátky proti Brs. Jako vhodný antigen byl zvolen syntetický derivát Brs - (20S)-2α,3α-dihydroxy-7-oxa-7α-homo-5α-pregnan-6-on-20-karboxylová kyselina (4812), který byl metodou směsných anhydridů nakonjugován na hovězí sérový albumin a křenovou peroxidasu.

Polyklonální protilátky získané ze séra naimunizovaných zvířat byly purifikovány pomocí imobilizovaného proteinu G a srážením $(NH_4)_2SO_4$ dialyzovány proti PBS pufru (pH-7,4). Charakteristika a specifita protilátek byla studována na základě kompetitivní enzymové imunoanalýzy

(ELISA). Z výsledků vyplývá, že získané protilátky jsou široce polyspecifické a proto byly použity k přípravě imunoafinitních kolon.

Kapacita imunoafinitních kolon byla stanovena pomocí HPLC/MS. Separace byla prováděna v systému s reverzními fázemi na koloně se sorbentem C18 (Phenomenex, Gemini 50 x 2,0 mm, 5µm). Jako mobilní fáze byla použita směs MeOH a 5mM kyseliny mravenčí v poměru 70% MeOH a 30% HCOOH.

[1] Sakurai A., Fujioka S.: *Plant Growth Regulation, 13*, 147-159, 1993.
[2] Schlagnhaufer C.D., Arteca R.N., Phillips A.T.: *J. Plant Physiol., 138*, 404-410, 1991.

1Po78

VIS/NIR SPEKTROSKOPICKÁ ANALÝZA JEČMENŮ A SLADŮ

Synytsya A.[a], Konečná P.[a], Čopíková J.[a] Havlová P.[b]

[a]Ústav chemie a technologie sacharidů, FPBT, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28, Praha 6 - Dejvice, Česká republika, e-mail: sinicaa@vscht.cz
[b]VÚPS, a.s., Sladařský ústav Brno, Mostecká 7, 614 00 Brno Česká republika

Ječmen dvouřadý (*Hordeum distichum var. nutans*) je jednou z obilovin využívaných pro výrobu sladu pro pivovarnický průmysl. Sladování je uměle vyvolaný proces klíčení ječných zrn přerušený v určitém stádiu. Obalové vrstvy zrna ječmene obsahují neškrobové polysacharidy, hlavně ß-glukanu a arabinoxylanu (pentosanu), které mohou působit potíže při filtraci piva [1-3]. VIS/NIR spektroskopie byla použita pro kalibraci ječmenů a sladů na obsah sušiny, ß-glukanů, pentosanů a veškerých fenolů. Kalibrační modely byly vypočteny pomocí modifikované metody nejmenších čtverců a ověřeny cross validací. Proměřovány byly vzorky ve formě mouky i zrna. Z vypočtených kalibračních a validačních hodnot lze usoudit, že ve všech případech nejlépe vycházeli kalibrace pro mouku. Kalibrace pro zrna vycházeli hůř pravděpodobně z důvodu menší homogenity vzorku. Po rozdělení souboru na ječmeny a slady se kalibrace na sušinu výrazně zhoršila, což může být zapříčiněno poklesem počtu vzorků a výrazným zúžením intervalu analytických hodnot. Pro stanovování sušiny metodou VIS/NIR lze doporučit proměřování vzorků ječmenů a sladů společně nebo použít větší soubor vzorků ječmenů nebo sladů pro jednotlivé kalibrace. Kalibrace pro ß-glukany vyšla lépe v případě ječmenů a to z důvodu vyšších analytických hodnot. Obsahy ß-glukanů u sladů se pohybují kolem 1 %, což jsou pro VIS/NIR hraniční hodnoty, pro které lze kalibraci sestavit.

[1] Han J. -Y., *Food Chemistry 70*, 131-138, (2000).
[2] Dervilly G., Leclercq C., Zimmermann D., Roue C., Thibault J. -F., Saulnier L., *Carbohydrate Polymers 47*, 143-149 (2000).
[3] Izydorczyk M. S., Macri L. J., MacGregor A. W., *Carbohydrate Polymers* 35, 249-258; 259-269 (1998).

1Po79

STUDIUM ACIDOBAZICKÝCH ROVNOVÁH OLIGONUKLEOTIDŮ POMOCÍ SPEKTRÁLNÍCH A CHEMOMETRICKÝCH METOD

Jana Topinková, Libuše Trnková

Katedra teoretické a fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity, Kotlářská 2, 611 37 Brno, Česká republika, e-mail: topca@chemi.muni.cz

Oligonukleotidy (ODN) tvoří krátké jednovláknové úseky DNA o jednotkách maximálně desítkách nukleotidů spojené mezi sebou fosfodiesterovou vazbou. Jejich fyzikálně-chemické vlastnosti významně pomáhají řešit problémy v oblastech diagnostiky, genetické analýzy (mapování genomické DNA, detekce mutací DNA) a terapie (výzkum anti-nádorových a HIV terapeutik) [1]. Naše práce se zabývala studiem acidobazických rovnováh vodných roztoků ODN (nonamerů) a stanovením jejich ionizačních konstant pomocí spektrálních a chemometrických metod. Součástí experimentu, ve kterém byly měřeny především UV/VIS spektra, bylo vytvoření speciální měřící aparatury kontinuálně snímající spektra jednotlivých měřených vzorků při nastavené teplotě. Pro zpracování UV spektrálních dat a stanovení pK_a studovaných ODN byla využita metoda vícesložkového rozlišení křivek, která s pomocí metody nejmenších čtverců (Multivariate Curve Resolution-Alternating Least Squares - MCR ALS) prováděné v Matlabu byla schopna určit zdánlivé ionizační konstanty [2]. Hodnoty těchto konstant byly sledovány a diskutovány v závislosti na: (i) primární a sekundární struktuře ODN, (ii) koncentraci přidané soli, popř. typu jejího kationtu a (iii) teplotě. Největší pozornost byla věnována ODN 5'- CCC AAA CCC - 3' a 5'- CAC CACA CAC - 3ī jako doplněk k elektrochemickému studiu těchto ODN na negativně polarizované visící rtuťové kapkové elektrodě, kde je adenin a cytosin elektroaktivní částicí [3].

Tato práce byla finančně podporovaná výzkumným projektem INCHEMBIOL (MSM 0021622412) a FRVŠ projekty č. 1147/2005 a 963/2005 od MŠMT České republiky.

[1] Jaumot J., Gargallo R.,Tauler R., *J. Biomol. Structure &Dynamics, 21*,267-277 (2003).
[2] Farková M., Lubal P., Havel J., *Chemical Papers, 58*, 299-305 (2004).
[3] Trnková L., Jelen F., Postbieglová I., *Electroanalysis* 2005, v tisku.

1Po80

VPLYV POVRCHOVEJ NÁBOJOVEJ HUSTOTY MONTMORILLONITOVÝCH ŠTRUKTÚR NA FLUORESCENČNÚ DYNAMIKU KUMARÍNU

Juraj Bdžoch, Ignác Bugár, Dušan Velič

Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina CH-1, 842 15 Bratislava, 1bdzoch@kosatka.fns.uniba.sk

Študovala sa statická a časovo rozlíšená fluorescencia molekuly kumarínu v dutinách radu hlinitokremičitanov s meniacou sa nábojovou hustotou. Fluorescenčnou metódou sa podarilo určiť vplyv povrchového náboja hlinitokremičitanových vrstiev na molekulu umiestnenú medzi nimi. Prírodné hlinitokremičitany vykazujú vysokú katalytickú aktivitu, vďaka značnému vnútornému povrchu s veľkým množstvom mikroskopických dutín. Tie sú vhodným médiom na stabilizáciu karbkatiónov a radikálov, extrémne krátko žijúcich v iných prostrediach [1]. Ukázalo sa, že pre častice vstupujúce do štruktúry hlinitokremičitanov je dôležitý náboj vrstiev, ktoré ohraničujú dutiny v nich [2,3]. Možno ho meniť interkaláciou Li^+ katiónov.

Dokázal sa vplyv nábojovej hustoty na povrchu montmorillonitov na fluorescenciu molekuly kumarínu umiestnenej v ich štruktúre. Na základe absolútnej polohy píkov fluorescenčných spektier možno konštatovať, že relaxačná schopnosť kumarínov umiestnených v montmorillonitoch s najnižšou povrchovou nábojovou hustotou je omnoho väčšia, než v prostredí s väčším nábojom. Tento trend je ešte výraznejší ak porovnávame nábojovú hustotu a Stokesove posuny.

Interakciu montmorillonitu s kumarínom umožňuje lepšie pochopiť analýza časovo rozlíšených spektier. Ukázalo sa, že relaxácia fluorescencie kumarínu je omnoho rýchlejšia v rigidnej štruktúre hlinitokremičitanu s najväčšou nábojovou hustotou, než vo vode. V prostredí s najmenšou nábojovou hustotou rastú možnosti stabilizácie excitovaného stavu, hoci relaxácia na základné vibračné hladiny je zrejme najviac podporovaná prostredím.

Táto práca vznikla za podpory grantov VEGA 1/0216/03 a APVT 298.

[1] Jockusch, S., Hirano, T., Liu, Z., Turro, N.J., *J. Phys. Chem. B*, 104, 1212-1216, (2000)
[2] Bujdák, J., Iyi, N., Kaneko, Y., Czímerová, A., Sasai, R., *Phys. Chem. Chem. Phys., 5*, 4680-4685, (2003)
[3] Bujdák, J., Janek, M., Madejová, J., Komadel, P., *J. Chem. Soc., Faraday Trans., 94*, 3487-3492, (1998)

1Po81

STUDIUM FÁZOVÉHO ROZHRANÍ KAPALINA - VYSOKOENERGETICKÝ POVRCH

Jana Vojtěchovská, Libor Kvítek, Jan Lasovský

Katedra fyzikální chemie PřF UP Olomouc, Třída Svobody 8, 771 46, jvojtechovska@volny.cz

Studium povrchových vlastností vysokoenergetických materiálů jako jsou kovy a jejich oxidy se v poslední době stávají důležitým článkem v rozvoji nových průmyslových aplikací. Způsobem jak získat znalosti o mechanismech povrchových jevů je studium vzájemných interakcí na fázovém rozhraní pevná látka - kapalina metodou dynamického kontaktního úhlu. Tato metoda poskytuje hysterezní křivky, které mohou vypovídat např. o adsorpci kapaliny na povrch materiálu nebo o různých specifických interakcích na rozhraní fází.

V rámci zlepšení technologie mytí polovodičových materiálů bylo studováno smáčení čistého Si připraveného řezáním drátovou technologií. Na drsném povrchu Si byla provedena celá řada experimentálních měření dynamických kontaktních úhlů různých typů kapalin vzhledem k jejich polaritě a chemické struktuře. Taková měření jsou relativně jednoduchým a citlivým nástrojem pro stanovení celkové povrchové energie pevné látky, i jejich složek (polární, disperzní, acido-bazická) [1].

Z porovnání výsledků jednotlivých experimentů vyplývá, že se použitá rozpouštědla dělí na dvě skupiny. První skupina rozpouštědel (alkoholy, uhlovodíky) povrch Si smáčí podle očekávaných předpokladů Zismanovy teorie. Druhá skupina rozpouštědel smáčí povrch Si dokonale nebo velmi dobře, a to i přesto, že se zde nachází takové kapaliny, které by podle hodnot své povrchové energie tento povrch smáčet neměly (formamid, DMSO). Pravděpodobně se zde projevují specifické interakce kapaliny s povrchem, na které bude zaměřena naše další pozornost.

[1] Holmberg K., Shah D.O., Schwuger M. J.; *Handbook of applied surface and colloid chemistry, Volume 1, 2*, John Wiley & Sons Ltd., Chichester 2002.

1Po82

EVALUATION OF THE MOBILITY OF Hg IN LIVING ENVIRONMENT

V. Vojteková, D. Mackových

University of P. J. Šafárik, Institute of Chemical Science, Moyzesova 11, 041 67 Košice, Slovakia,
e-mail: vojtekv@kosice.upjs.sk
Geological Survey of SR, Markušovská cesta 1, 052 40 Spišská Nová Ves, Slovakia,
e-mail: mackovych@gsrcsnv.sk

Extraction of soils (sediments) into chelating agent is presented as an economically interesting and time saving supplementary test to routinely used sequential extraction

procedures (SEPs) [1,2]. Single and SEPs were applied to contaminated soils (sediments) coming from polluted regions. SEP recommended by the IRMM (Institute for Reference Materials and Measurements) was applied and used like reference extraction. Single-step extraction into 0.05 mol L^{-1}EDTA was modified for this study. Removal efficiency of „EDTA extraction" was compared with the „IRMM sequential extraction procedure". The element contents extracted into EDTA are in good agreement with mobile and potentially mobile portion of Hg in the samples. Therefore „EDTA extraction" could be well used for fast alarm indication of element mobility changes in environmental systems, for a screening control of soil (sediment) pollution and could reflect the Hg mobility in the biotope of studied region [3]. Usually such - first information is sufficient for decisionmaking in the area of environmental protection.

This work is a part of the VEGA Grant Project No. 1/0386/03 and 1/0448/03. The authors would like to express their gratitude to the Scientific Grant Agency of the Ministry of Education of the Slovak Republic and the Slovak Academy of Sciences for financial support.

[1] V. Vojteková et al: *Slovak Geol. Mag., 9* (2-3), 133-136 (2003).
[2] V. Vojteková et al: *Microchim. Acta, in press* (2005).
[3] G. Holéczyová et al: *Transaction of the Universities of Košice, 2*, 76-79 (2004).

1Po83

ANALÝZA NOVÝCH ANTIDEPRESÍV V TABLETÁCH METÓDAMI LC

D. Briňarská[1], I.A. Amar[1], T. Gondová[1], K. Špacayová[2], V. Vojteková[1]

[1]Katedra fyzikálnej a analytickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P.J. Šafárika, Moyzesova 11, SK 040 01 Košice, Slovenská republika
[2]Ústav súdneho lekárstva, Lekárska fakulta, Univerzita P.J. Šafárika, Šrobárova 2, SK-040 80 Košice, Slovenská republika
e-mail: brinarskad@yahoo.com, gondova@kosice.upjs.sk

Antidepresíva III. generácie, označované aj ako SSRI (selective serotonine reuptake inhibitors), predstavujú skupinu nových antidepresív, ktoré selektívne inhibujú spätné zachytávanie serotonínu. V Slovenskej a Českej republike sú registrované: sertralin, fluvoxamin, fluoxetin, paroxetin a citalopram, ktoré sa okrem liečby depresie používajú aj pri liečbe bulímie, postraumatických stresových porúch či patologického hráčstva, a preto sú používané ako antidepresíva prvej voľby.

Na monitorovanie terapie a analýzu antidepresív v prípade intoxikácie sa vďaka svojej rýchlosti a spoľahlivosti frekventovane využívajú najmä chromatografické separačné metódy - HPLC, GC[1,2].

Cieľom prezentovanej práce bolo vyvinutie jednoduchej, toxikologicky využiteľnej skríningovej metódy tenkovrstvovej chromatografie (TLC) pre simultánnu separáciu štyroch antidepresív používaných v klinickej praxi - citalopram, sertralin, fluvoxamin a fluoxetin. TLC separácia sa uskutočnila v mode normálnych a reverzných fáz s denzitometrickou detekciou. Pre analyzované liečivá boli po výbere optimálnych separačných podmienok stanovené medze detekcie (LOD).

Navrhnutá metóda bola aplikovaná na analýzu antidepresív v reálnych biologických vzorkách moču, krvi a krvnom sére, po ich izolácii extrakciou v systéme kvapalina-kvapalina (LLE), alebo extrakciou tuhou fázou (SPE).

Súčasne sa uskutočnilo testovanie metódy na možnosť využitia v kvantitatívnej analýze - na stanovenie študovaných antidepresív v komerčných preparátoch liečiv.

Práca bola podporovaná grantom MŠ SR VEGA (1/0448/03).

[1] C.B. Eap, P. Bauman, *J. Chromatogr. B 686*, 51, 1996
[2] C. Frahnert, M.L. Rao, K. Grasmäder, *J. Chromatogr. B 794*, 35, 2003.

1Po84

A NOVEL AAPROACH IN THE STUDY OF COMPOUNDS EMITTED BY *IXODES RICINUS* (ACARI:IXODIDAE): THE USE OF AN ARTIFICIAL TICK

Helena Zahradníčková[a], Edwin A. P. Bouman[b], Blanka Kalinová[c]

[a] Institute of Entomology, Academy of Sciences of the Czech Republic, Branišovská 31, 370 05 České Budějovice, Czech Republic, e-mail: helenaz@entu.cas.cz
[b] Institute of Parasitology, Academy of Sciences of the Czech Republic, Branišovská 31, 370 05 České Budějovice, Czech Republic
[c] Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic Flemingovo n. 2., 166 10 Praha 6, Czech Republic

Solid Phase Microextraction Method (SPME) on polydimethylsiloxane (PDMS) 100 Ķm fibre was successfully used to trap and identify volatiles emitted by the tick Ixodes ricinus. Equilibration time for SPME was optimized using a mixture of 4 synthetic tick-pheromone-derived volatiles (so called artificial tick - including acetophenone, 4-heptanolide, methyl-2 benzoate and methyl-3-chloro-4-methoxybenzoate). SPME coupled with GC-MS analysis reveals a robust linearity over a wide range of concentrations. Calibration curves for all chosen standards posses a correlation coefficient higher than 0.98. The detection limits were found 0.25 ng for acetophenone, 0.5 ng for (+/-) 4-heptanolide, 0.19 ng for methyl-2-methoxybenzoate and 1 ng for methyl-3-chloro-4-methoxybenzoate. The newly developed method was able to detect natural methyl-3-chloro-4-methoxybenzoate (MCB) emitted by only 5 engorged I. ricinus females suggesting that amount of MCB emitted by individual females is on average 0.39 ng.

1Po85

ELECTROCHEMICAL DETERMINATION OF CYSTEINE USING CHEMICALLY MODIFIED CARBON PASTE ELECTRODE

Tomáš Zelený[a], Jan Hrbáč[a], Yakov I. Tur`yan[b]

[a] *Katedra fyzikální chemie, Univerzita Palackého Olomouc, Tř. Svobody 26, Olomouc 771 46,*
e-mail: tomas.zeleny@olomouc.cz
[b] *Department of Pharmacy, The Hebrew University of Jerusalem, P.O.Box.12065, Jerusalem 91120, Israel*

We have modified the cysteine determination method outlined in the work [1]. The modification is based on the addition of potassium chloride and TWEEN 40 surface active agent into tested solution as well as the change in the potential program imposed onto the electrode. The electrode is sensitive to the presence of cysteine in micromolar concentration range. We have found that the electrode can be regenerated by exposing it to positive potential (300 - 500 mV vs. Ag/AgCl), and reused with relatively good reproducibility. Electrode responses to cysteine in dependence on pH, ionic strength, accumulation potential and accumulation time were investigated.

[1] K. Sugava, S. Tanaka, M. Taga: Voltammetric behavior of cysteine by a carbon-paste electrode containing a cobalt (II) cyclohexylbutyrate, *Bioelectrochemistry and Bioenergetics, 26(3)*, 469-474 (1991).

1Po86

HPLC STANOVENÍ AMINODERIVÁTŮ NAFTALENU POMOCÍ UHLÍKOVÝCH PASTOVÝCH ELEKTROD

Jiří Zima, Hana Dejmková, Jiří Barek

Univerzita Karlova v Praze, Katedra analytické chemie,UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Albertov 6, 128 43 Praha 2, Česká republika,
e-mail: zima@natur.cuni.cz

Aminoderiváty polycyklických aromatických uhlovodíků patří mezi nejvýznamnější polutanty pracovního a životního prostředí. Vzhledem k jejich karcinogenním účinkům na člověka je stále věnována velká pozornost vývoji nových a vysoce citlivých metod jejich stanovení [1]. Kvůli komplikovanosti environmentálních matric jsou ke stanovení organických polutantů nejčastěji využívané metody separační, a to především HPLC. V této práci jsme se zaměřili na využití uhlíkové pastové elektrody k elektrochemické detekci při HPLC stanovení 1-naftylaminu, 2-naftylaminu, 1,5-diaminonaftalenu a 1,8-diaminonaftalenu [2]. Použitá uhlíková pasta byla připravena z mikrokuliček skelného uhlíku a minerálního oleje a umožnila práci v prostředí o vysoké koncentraci organického modifikátoru, který pasty založené na běžném uhlíkovém prášku velmi rychle degraduje. Detekční potenciály byly určeny z hydrodynamických voltamogramů výše uvedených analytů. Nejnižší meze detekce $5{,}4.10^{-9}$ mol l^{-1} bylo dosaženo pro 1,5-diaminonaftalen, přičemž ve všech čtyřech případech byla mez detekce s elektrochemickým detektorem nižší, než s detektorem fotometrickým. Nově vypracovaná metoda HPLC stanovení aminoderivátů naftalenu byla ověřena i na modelových vzorcích pitné a říční vody.

JZ a HD děkují za finanční podporu GA ČR (grant 203/04/0136).

[1] Barek J., Mejstřík V., Muck A., Zima J.: Crit. Rev. *Anal. Chem. 30*, 37-43 (2000).
[2] Dejmková H.: *Diplomová práce*, UK v Praze, PřF, Praha 2005.

1Po87

PREPARATION OF NEW PHOTOCATALYTIC IMMOBILIZED TIO_2 LAYERS

Jiří Zita[a], Michal Veselý[a], Petr Dzik[a]

[a]*Brno University of Technology,*
Faculty of Chemistry, Department of Physical and Applied Chemistry,
Purkyňova 118, 612 00 Brno, Czech republic,
e-mail: zita@fch.vutbr.cz

Nowadays, when photocatalytic processes had found practical applications in decomposition of hazardous organic compounds and in waste water and air treatment, the properties required for the used catalysts are much higher. The contemporary trend is heading towards to use catalyst in form of the thin immobilized layers in stead of use a powder form of the catalyst, which must be expensively removed from solution and than renewed.

There are many methods of TiO_2 immobilization, but not every prepared catalyst layer is appropriate to given photocatalytic process. The most common way, how to create the immobilized TiO_2 layer is sol-gel process. This method is relatively expensive and laborious. Another possibility is anchoring of the powder TiO_2 in to the matrix of appropriate material [1].

In our work we have focused on the preparation of immobilized TiO_2 catalyst layer by sol-gel method, where we have studied the different procedure of preparation. Then we have fixed powder TiO_2 into layers, where paper and modified PVA basis had been used. To find out the photocatalytic attribute of the layers, we have run several photocatalytic reactions, such as oxidation of 2,6-DCIP and reduction of different metals ions.

[1] S. Senthilkumaar, K. Porkodi; *Journal of Colloid and Interface Science 288*, p. 184-189 (2005).

1Po88

DYNAMIKA FLUORESCENCIE KUMARÍNU V MONTMORILLONITOCH

J. Bdžoch[1], M. Žitňan[1], I. Bugár[2], V. Szöcs[1], T. Pálszegi[3], M. Janek[4], D. Chorvát[1], D. Velič[1, 2]

[1]Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava
[2]Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava
[3]Slovenská Technická Univerzita, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
[4]Inštitút pre technickú chémiu, technológiu vody a geotechnológiu, 76021 Karlsruhe

Medzi základné procesy v chémii patrí interakcia medzi molekulou a prostredím. Táto interakcia je študovaná femtosekundovou časovo rozlíšenou spektroskopiou. V systéme sa použila molekula kumarínu C 522 ($C_{14}H_{12}F_3NO_2$) ako fluorescenčná sonda, ktorá interaguje s vrstevnatou štruktúrou minerálu monrmorillonit. Chemickou modifikáciou jemnej frakcie montmorillonitu sa upravil náboj vrstiev za vytvorenia plne hydratovaných vrstiev. Časovo rozlíšená fluorescenčná spektroskopia ako užitočný nástroj pri skúmaní interakcií rozpúšťadlo-rozpustená látka už bola použitá v systémoch, kde kumarín predstavoval rozpustenú látku a cyklodextrín vo vodnom roztoku zasa rozpúšťadlo [1-2]. Podobná supramolekulová hosť-hostiteľ štruktúra sa testovala na tvorbu supramolekulovej samousporiadanej vrstva na tuhom povrchu [3]. Merania sa zameriavajú na dynamiku fluorescencie fluorescenčných farbív použitých ako sondy v čistých rozpúšťadlách, predstavujúcich voľné prostredie a v disperziách hlinitokremičitanov predstavujúcich prostredie s obmedzeným pohybom. Výsledky popisujú adsorpciu medzi molekulou farbiva a nanoštruktúrami v oblasti ultrarýchlej relaxácie vo forme fluorescencie.

Táto práca vznikla za podpory grantov VEGA 1/0216/03 a APVT 298.

[1] S. Vajda, R. Jimenez, S. J. Rosenthal, V. Fidler, G. R. Fleming, E. W. Castner, *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 91* (1995) 867.
[2] A. Douhal, T. Fiebig, M. Chachisvilis, A. H. Zewail, *J. Phys. Chem. A 102* (1998) 1657.
[3] D. Velič, G. Koehler, *Chem. Phys. Lett.* 371 (2003) 483.

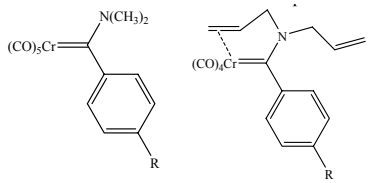
1Po89

VLIV CENTRÁLNÍHO KOVU, KOORDINAČNÍ GEOMETRIE A TYPU LIGANDŮ NA ELEKTROCHEMICKOU OXIDACI AMINOKARBENOVÝCH KOMPLEXŮ CHROMU, WOLFRAMU A ŽELEZA

Irena Hoskovcová[a] , Jana Roháčová[b,c], Jiří Ludvík[b], Dalimil Dvořák[c]

[a] Ústav anorganické chemie VŠCHT, Technická 5, 166 28 Praha 6,
e-mail: irena.hoskovcova@vscht.cz
[b] Ústav fyzikální chemie Jaroslava Heyrovského AVČR, Dolejškova 3, 182 23 Praha 8
e-mail: ludvik@jh-inst.cas.cz
[c] Ústav organické chemie VŠCHT, Technická 5, 166 28 Praha 6
e-mail: dalimil.dvorak@vscht.cz

Byly připraveny komplexy chromu (**I, II, VI**), wolframu (**III, IV**) a železa (**V**) s aminokarbenovými ligandy lišícími se přítomností chelatujícího allylového řetězce a substitucí na karbenovém atomu uhlíku. Byla sledována míra vlivu různých strukturních proměnných na jejich elektrochemické chování v nevodném prostředí.

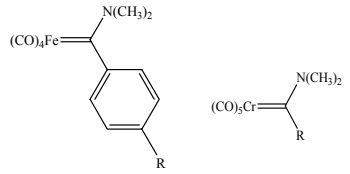


I a,b,c,d,e
R = OCH_3, CH_3 ,H, Cl, CF_3

II a,c,d,e
R = OCH_3, H, Cl, CF_3

III c
W; R = H

IV c
W; R = H



V a,b,c,d,e
R = OCH_3, CH_3,H, Cl, CF_3

VI b,c,f
R = CH_3,H, C_6H_5

Při oxidaci je elektron odebírán z HOMO orbitalu, který je lokalizován na atomu kovu. Bylo zjištěno, že E_{ox} prakticky nezávisí na substituentech karbenového ligandu (na rozdíl od redukce, kde je tato závislost významná), zato závisí srovnatelnou měrou jak na přítomném kovu, tak na složení koordinační sféry, kde je určujícím parametrem počet ligandů s π-akceptorovou schopností. Jejich přítomnost snižuje elektronovou hustotu na kovu a výrazně znesnadňuje oxidaci molekuly.

Z naměřených hodnot E_{ox} a E_{red} byla určena experimentální velikost ΔE odpovídající Δ(LUMO-HOMO) molekuly. Bylo prokázáno, že rozdíl energií hraničních MO závisí na výše uvedených parametrech a navíc na počtu ligandů v

koordinační sféře kovu. Získané výsledky byly srovnány s UV-VIS spektry těchto látek a ve vybraných případech s teoretickým výpočtem.

Tato práce byla podporována grantem GAŘ 203/04/0487.

[1] Hoskovcová, I.; Roháčová, J.; Meca, L.; Tobrman, T.; Dvořák, D.; Ludvík, J., *Electrochim. Acta*, přijato k publikování 2004.

1Po90

DETERMINATION OF SELENIUM BY FLOW - THROUGH STRIPPING COULOMETRY

Alena Manová, Stanislava Hlúbiková, Ernest Beinrohr, Milan Střelec

Slovak University of Technology, Department of analytical chemistry,
Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovak republic
e-mail: stanka.hlubikova@centrum.sk

Selenium can also be determined by flow-through stripping coulometry. The principle of this method is the same as that in the potentiometric stripping analysis (PSA), where the analyte is collected from the sample solution on the working electrode at a constant deposition potential and then the deposit is dissolved chemically or electrochemically while the potential of working electrode is monitored. The time duration of the stripping process for a given species (chronopotentiometric transition time) is proportional to its concentration in the sample solution. The presented method makes use of a simple flow-through system with a cell containing a porous working electrode. If the deposit is stripped by a known constant current, the amount of the deposit, and its concentration in the sample solution as well, could be directly calculated from Faraday's law and the tedious and time consuming calibration process could be avoided. This work describes a new validated method for determination of selenium in laboratory prepared samples by flow-through coulometry at E-CA/Au. The validation of this method includes the limit of detection (LOD) and the limit of quantification (LOQ), respectively. Other validation parameters such as repeatability, reproducibility were achieved too.

This work was supported by the Grant Agency of Science VEGA (Project No.1/2464/05).

1Po91

INTERDIGITATED MICROELECTRODE ARRAYS - NEW TOOL FOR PHARMACEUTICAL ANALYSIS

Peter Tomčík, Dušan Bustin, Miroslav Rievaj

Department of Analytical Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology Bratislava, Radlinského 9, Bratislava SK - 812 37, Slovak Republic
email: tomcik@cvt.stuba.sk

An interdigitated array (IDA) system composed of galvanostated generator and potentiostated collector microelectrodes was applied to the analysis of Vitamin C (Celaskon, Léčiva CZE, ascorbic acid - AA) and a popular drug for alcoholism treatment Antabus (Disulfiram, Alpharma NOR, tetraethylthiuram disulphide - TETD) pharmaceutical dosage forms. The method proposed here is based on transfer of electrogenerated suitable precursor between two individually addressable segments of IDA array. Influence of this transfer by precursor chemical reaction with active species of the pharmaceutical preparate has been evaluated and applied for their determination. This technique has been called diffusion layer titration [1]. Chemical reaction proceeding quantitatively only in a close vicinity of the electrode. One segment of the interdigitated array serves for galvanostatic anodic generation of iodine from KI resp. hypobromite from KI and the second segment immersed in the diffusion layer of the generator, detects their unreacted fluxes. The detector (collector) is potentiostated to the potential of the limiting diffusion current of iodine resp hypobromite reduction. Because of short distance between generator and collector the collection efficiency is high (about 85%). The diffusion layer titration curves (collector current versus generator current plots) measured 'point by point' or by slowly scanning the generator current, show very good reproducibility. Since no bulk phase chemical reaction actually proceeds, the experiment can be repeated extensively in the same solution. By evaluation of generator vs. collector current dependencies for various additions of AA or TETD a generator current in the ekquivalent point of diffusion layer titration I_{genE} was obtained. It is proportional to the concentration of analyte. The sensitivity of this method is 0.12×10^{-2} A M^{-1} and the detection limit is 4 x 10-6 M for AA determination. For the determination of TETD the sensitivity was 2.6×10^{-2} A M^{-1} and detection limit (based on 3s critetrion) 9×10^{-7} M was obtained. The procedure of the determination involves tablet dissolution and filtration of its unsoluble portion resp. dissolution of Antabus in dioxane as a solvent stabile to hypobromite oxidation for determination of TETD. A direct analysis was performed by the standard addition plot method in precursor solution.

[1] Tomčík P., Krajčíková M., Bustin D., *Talanta 55*, 1065-1070 (2001).

1Po92

APPLICABILITY OF PM3 AND AM1 SEMI-EMPIRICAL METHODS FOR THE STUDY OF N-H AND O-H BOND DISSOCIATION ENTHALPIES OF PRIMARY ANTIOXIDANTS

Erik Klein[a], Ján Rimarčík[a], Vladimír Lukeš[b], Júlia Pigošová[a]

[a]Department of Physical Chemistry, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava, Slovak Republic
[b]Department of Chemical Physics, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava, Slovak Republic

The study of twenty six substituted anilines and phenols is presented. These represent model structures of amine and phenol type antioxidants. Molecules and their radical structures were studied using the PM3 and AM1 quantum chemical methods in order to calculate the N-H and O-H bond dissociation enthalpies (BDEs) which belong to the most important characteristics of antioxidants. PM3 provides BDE values of N-H bond dissociation in better agreement with experiments. On the other hand, AM1 offers more reliable BDEs of substituted phenols. In both series of molecules AM1 calculated ΔBDEs (the difference in BDEs of substituted and non-substituted compound) correspond to experimental data better than PM3 values. Obtained results indicate that Hammett constants describe the effect of the substituents on N-H and O-H bonds strength (BDE) satisfactorily.

1Po93

ANALÝZA MEZIPRODUKTŮ HOMOGENNÍCH STEREOSELEKTIVNÍCH KATALYZÁTORŮ NA BÁZI KLASTROVÝCH SLOUČENIN BORU

A. Langauf[1,2], A. Laromaine[3], C. Vinas[3], F. Teixidor[3], H. Horáková[1,2], R. Vespalec[1]

[1] Ústav analytické chemie AV ČR, Veveří 97, 611 42 Brno, e-mail: langauf@iach.cz
[2] Katedra analytické chemie Přírodovědecké fakulty univerzity Palackého v Olomouci
[3] Institut de Ciencia de Materials de Barcelona (CSIC), 08 193 Bellaterra, Spain

Klastrové sloučeniny boru jsou čistě syntetické látky. Jsou vysoce hydrofobní a většina z nich je chirální. Mezi perspektivní oblasti jejich využití patří i ty, v nichž chiralita hraje podstatnou roli. Studované sloučeniny, kyselina 7-(2'-pyridyl)-7,8-*nido*-$C_2B_9H_{12}$ a její tetramethylamonná sůl [NMe_4][7-(2'-pyridyl)-7,8-*nido*-$C_2B_9H_{12}$], jsou meziproduktem syntézy komplexů, které mají v praxi sloužit jako chirální homogenní katalyzátory. Cílem studie bylo zjistit čistotu těchto sloučenin a prokázat jejich očekávanou chiralitu.

Tyto nebo obdobné klastrové sloučeniny boru nebyly nikdy analyzovány kapilární zónovou elektroforézou. Jejich chování je jiné než u organických sloučenin. Proto je nutné ověřovat každý jednotlivý krok, který má pomoci při vývoji metod jejich analýzy. Pro fotometrickou detekci byla změřena UV-VIS spektra obou sloučenin. UV-VIS spektrum kyseliny se liší od spektra její soli. To dokazuje změnu chromoforního systému anionu, který vzniká disociací kyseliny v bazickém a neutrálním prostředí. Stabilitní studie ukázala, že sůl v roztoku není stabilní. Vzorek soli starý čtyři měsíce obsahuje dva rozkladné produkty. U studované kyseliny i její tetramethylamonné soli nebyly detekovány nečistoty ani při nástřiku 10 mM vzorků. S β-cyklodextrinem, jako chirálním selektorem jsme prokázali chiralitu obou studovaných sloučenin, i když rozdíly elektroforetických mobilit stericky odlišných forem anionu [7-(2'-pyridyl)-7,8-*nido*-$C_2B_9H_{11}$]- jen nepatrně převyšovaly $0{,}1 \times 10^{-9}$ $m^2V^{-1}s^{-1}$.

Tato studie byla finančně podpořena ústavním výzkumným projektem AV0Z40310501, Akademie věd České republiky.

1Po94

MOŽNOSTI PŘÍPRAVY KOLOIDNÍCH ČÁSTIC STŘÍBRA CHEMICKOU REDUKCÍ STŘÍBRNÉ SOLI

Libor Kvítek, Robert Prucek, Aleš Panáček, Radko Novotný

Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, tř. Svobody 26, 771 46 Olomouc, Česká Republika, e-mail: kvitek@aix.upol.cz

Fenomén koloidního stříbra v poslední době pronikl z vědeckých laboratoří do našeho každodenního života v souvislosti s jeho aplikačními možnostmi zejména díky jeho baktericidním účinkům. Ovšem nejen tato, ale i další aplikace koloidního stříbra, jsou závislé především na velikosti částic stříbra, což obrací zájem na metody řízené přípravy koloidního stříbra, kde v současnosti převládají metody založené na chemické redukci rozpustné stříbrné soli. Vlastní řízení přípravy částic stříbra požadované velikosti se pak může odehrávat buď ve dvou krocích, zvětšováním primárně připravených velmi malých částic [1], nebo v je-diném kroku změnou reakčních podmínek či přídavkem látek modifikujících stav povrchu a tedy i rychlost růstu částic stříbra. Do této oblasti spadá jednostupňová metoda využívaná na našem pracovišti, kdy redukce stříbrné soli probíhá v systému obsahujícím látku, tvořící se stříbrným iontem komplexní iont. Stabilita tohoto komplexního iontu a koncentrace komplexotvorného činidla pak určují koncentraci volných stříbrných iontů pro redukci, což je rozhodující faktor pro řízenou přípravu koloidních částic stříbra. V závislosti na použité redukční látce a komplexotvorném činidle se dosažitelný rozsah velikostí pohybuje od několika málo desítek až po stovky nanometrů [2,3].

Autoři děkují za finanční podporu MŠMT ČR, grant MSM 6198959218.

[1] Shirtcliffe, N., Nickel, U., Schneider, S., *J. Colloid Interf. Sci., 211*, 122-129, (1999).
[2] Kvítek, L., Prucek, R., Pikal, P., Novotný, R., *Acta Univ. Palacki. Olom., Chemica 38*, 33-40, (1999).
[3] Kvitek L., Prucek R., Panacek A., Novotny R., Hrbac J., Zboril R., *J. Mater. Chem., 15*, 1099-1105, (2005).

1Po95

NĚKTERÉ PŘÍKLADY POUŽITÍ POLAROGRAFIE A VOLTAMERIE V ANALYSE ORGANICKÝCH LÁTEK

Petr Zuman

Department of Chemistry, Clarkson University, Potsdam, NY 13699-5810, USA email: zumanp@clarkson.edu

Světový trend do značné míry nahradil spektrometrické a elektroanalytické metody v praktické analyse chromatografickými a příbuznými metodami. Ty jsou dnes obecně užívány i v případech, kdy nejsou prokázany jako nejvhodnější metoda pro stanovení dané látky v dané matrici (typu vzorku).

Elektroanalytické metody nabízejí alternativní řešení jednak při analysách jednoduchých vzorků s jedinou elektroaktivní součástí, jednak při analysách heterogenních směsí. Příkladem prvního druhu použití jsou analysy léků. Možnost takových aplikací bude demonstrována na analysách některých cefalosporinů, Viagry a Abacaviru (prostředek k léčení AIDS). Příkladem analys heterogenních systemů, kde přítomnost rozptýlených špatně rozpustných a koloidních částic neruší polarografické stanovení, jsou studia reakcií žlučových kyselin s ionty těžkých kovů a studia adsorpce pesticidů na lignin a sledování alkalického rozkladu ligninů.

2Po01

INTERAKCIA OXO-PEROXOKOMPLEXU VANÁDU(V) S DNA

L. Andrezálová[a], Z. Ďuračková[b], H. Gbelcová[c], S. Jantová[c]

[a] *Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, e-mail: andrezalova@fns.uniba.sk*
[b] *Ústav lekárskej chémie, biochémie a klinickej biochémie, Lekárska fakulta Univerzity Komenského, Sasinkova 2, 811 08 Bratislava*
[c] *Katedra biochémie a mikrobiológie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava*

Procesy oxidačného poškodenia DNA v zdravých bunkách sú pre organizmus vysoko toxické, pretože sú základom mutácií a môžu byť príčinou smrti bunky a organizmu. Na druhej strane sa mechanizmus štiepenia molekuly DNA môže využiť na zastavenie nekontrolovaného delenia nádorových buniek. V poslednom období sa zintenzívnil záujem o štúdium protinádorového účinku komplexných zlúčenín vanádu [1, 2]. Cieľom práce bolo štúdium interakcie monoperoxokomplexu vanádu $P_{r4}N[VO(O_2)(ox)(phen)]$ (**Vphen**) [3], [*phen* = 1,10-fenantrolín, *ox* = oxalát(2-) a $P_{r4}N$ = tetra(*n*-propyl)amónny kation] s DNA. Oxidačné poškodenie DNA v prítomnosti **Vphen** sa sledovalo pomocou UV-VIS spektrofotometrie a jednobunkovej gélovej elektroforézy (Comet Assay). Poškodenie DNA v prítomnosti **Vphen** a peroxidu vodíka pri fyziologickom pH sa prejavilo v spektre DNA hyperchrómnym efektom pri 260 nm. Výsledky jednobunkovej gélovej elektroforézy potvrdili vznik jednoreťazových zlomov v DNA ľudských lymfocytov po inkubácii s komplexom pri rôznych koncentráciách.

Protinádorový účinok **Vphen** bol sledovaný na leukemických myšacích bunkách línie L1210. 24 hodinová inkubácia buniek pri rôznych koncentráciách komplexu potvrdila jeho cytostatický účinok s hodnotou IC_{50} = 0,495 μmol/dm^3.

Prezentované výsledky sú súčasťou riešenia grantov VEGA č. 1/1157/04 a č.1/1375/04

[1] Sam, M., Hwang, J.H., Chanfreau, G., Abu-Omar, M.M.: *Inorg. Chem., 43*, 8447-8455, (2004)
[2] DīCruz, O.J., Dong, Y.H., Uckun, F.M.: *Anti-Cancer Drugs, 11*, 849-858, (2000)
[3] Tatiersky, J., Schwendt, P., Marek, J., Sivák, M.: *New J. Chem., 28*, 127-133, (2004)

2Po02

ELECTROCHEMICAL REACTIONS OF SULPHUR IN CHLORIDE AND FLUORIDE MELTS

M. Ambrová, P. Fellner

Slovak University of Technology in Bratislava, Department of Inorganic Technology, Radlinského 9, Bratislava SK - 812 37 Slovakia, e-mail - marta.ambrova@stuba.sk

In the electrolyte used for the production of aluminium, sulphur originates mainly from two sources. Petroleum coke used for the production of carbon anodes contains 0.7 - 3.5 mass % sulphur. Cryolite and aluminium fluoride also contain sulphur, mainly as sulphates (up to 1 %) [1]. Sulphur leaves the aluminium reduction cell mainly as SO_2, with minor amounts of COS, CS_2 and H_2S [2, 3]. No data on the electrochemical reaction of sulphates in fluoride-based melts are available but several authors have investigated the electrochemical reactions of sulphates in chloride melts. However, opinions on the behaviour of sulphate ions in molten electrolytes are rather contradictory.

The cathodic and anodic processes of sodium sulphate dissolved in molten sodium chloride and sodium fluoride were investigated by chronopotenciometry at the temperature 820 °C and 1000 °C, respectively. The mechanism of the cathode reaction in the melts containing sulphate was elucidated. The electroactive species is SO3. It originates from the thermal decomposition of SO_4^{2-} anion. The anode reactions of sulphate dissolved in chloride and fluoride melts were investigated on platinum and gold working electrodes. When gold was used, the sulphate ion was electrochemically inactive. On platinum, however, oxygen was developed.

[1] Thonstad J., Fellner P., Haarberg G. M., Híveš J., Kvande H., Sterten Å ., *Aluminium Electrolysis, 3-rd edition*, Aluminium Verlag, Düsseldorf, 279, 2001.
[2] Oedegard, R., Roenning, S., Sterten, Å., Thonstad, J., *Light Metals*, 661-670, 1985.
[3] Hay, S. J., Hyland, M. M., Metson, J. B., Bade, O. M., *11th International Aluminium Symposium*, September 19-22, 2001, Trondheim-Bergen-Trondheim, Norway.

2Po03

A UNIQUE EXAMPLE OF „ABSOLUTE TAUTOMERISM“ IN THE ZWITTERIONIC 7-RR'NH-*nido*-$C_3B_8H_{10}$ TRICARBOLLIDE SERIES

Mario Bakardjiev[a], Josef Holub[a], Drahomír Hnyk[a], Ivana Císařová[b], Michael G. S. Londesborough[a], Dmitry S. Perekalin[c], Bohumil Štíbr[a]

[a]Institute of Inorganic Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic CZ-250 68 Řež, the Czech Republic, mario@iic.cas.cz
[b]Faculty of Natural Sciences of Charles University, Hlavova 2030, CZ-128 42 Prague 2, the Czech Republic
[c]A. N. Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds, Russian Academy of Sciences, 28 ul. Vavilova, 119991, Moscow GSP-1, Russian Federation

Tautomerism, which is a dynamic equilibrium between two or more alternative structures of a single species, has been observed for many compounds in organic chemistry. The commonest case of tautomerism, when the electrofuge is a proton, is known as *prototropy*. Herein we report a unique example of a straightforward structural dualism in the „zwitterionic“ 7-RR'NH-7,8,9-$C_3B_8H_{10}$ (where R,R' = hydrogen or alkyls) [1-3] tricarbollide series in which a compound can be quantitatively converted into its tautomer just by simple dissolution in a suitable solvent. In terms of organic chemistry terminology this phenomenon can be classified as „absolute tautomerism“.

The work was supported by the Grant Agency of the Czech Republic (project 203/05/2646) and Ministry of Education of the Czech Republic (project LC523).

[1] B. Štíbr, J. Holub, F. Teixidor, C. Vinas, *Chem. Commun., 18*, 795-796, (1995).
[2] B. Štíbr, J. Holub, I. Císařová, F. Teixidor, C. Vinas, J. Fusek, Z. Plzák, *Inorg. Chem., 35*, 3635-3642, (1996).
[3] B. Štíbr, J. Holub, J. Plešek, T. Jelínek, B. Grüner, F. Teixidor, C. Vinas, *J. Organomet. Chem., 582*, 282-285, (1999).

2Po04

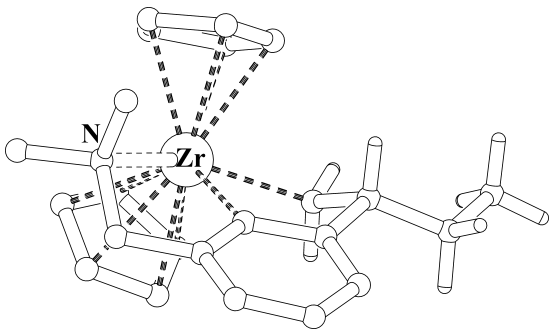
POKUSY O PŘÍPRAVU HETEROBIMETALICKÝCH SLOUČENIN S VAZBOU KOVŮ 4. A 14. SKUPINY PS

Josef Bareš[a,b], Aleš Růžička[a], Milan Nádvorník[a], Phillipe Meunier[b]

[a]Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická,
Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565,
53210 Pardubice.
[b]Université de Bourgogne, Faculté des Sciences Gabriel, LSEO - UMR 5632, 6 Bd Gabriel, 21000 Dijon, FRANCE.

V chemickém průmyslu je při výrobě rozličných materiálů rozsáhle využívána homogenní katalýza. S tím jsou spojeny vysoké nároky na používané katalyzátory. Je žádoucí, aby jejich příprava nebyla náročná, aby byly stálejší na vzduchu a vykazovaly maximální selektivitu.

K řadě oligomeračních a polymeračních reakcí se používají organokovové sloučeniny prvků 4. skupiny PS. Naším záměrem je příprava sloučenin prvků 4. skupiny PS substituovaných deriváty organokovových sloučenin dvojmocných kovů 14. skupiny PS, a sice pro jejich analogii s karbeny. V příspěvku bude diskutována reaktivita titanocen- a zirkonocendichloridů a jejich analogů se stannyleny a plumbyleny.



Obr. 1. Molekulární struktura produktu reakce komplexu bis(η^5-cyklopentadienyl)-bis(1-butyl)zirkoničitého s komplexem bis[2-(N,N-dimethylaminomethyl)phenyl]cínatým.

Poděkování: Autoři si dovolují poděkovat GA ČR (203/02/D169) a Velvyslanectví Francouzské republiky (Programme Cotutelle) za finanční podporu.

2Po05

SEKVENČNÍ EXTRAKCE UHLÍ A NEDOPALU Z ELEKTRÁREN S CIRKULUJÍCÍ FLUIDNÍ VRSTVOU

Lucie Bartoňová, Zdeněk Klika

VŠB-Technická univerzita Ostrava, Tř. 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava - Poruba lucie.bartonova@vsb.cz

Tato práce se zabývá způsobem vazby Cu, Co, Cr, Ni, Pb, As a Se v uhlí a nedopalu ze tří elektráren s cirkulující fluidní vrstvou. Formy výskytu těchto prvků byly studovány metodou sekvenční extrakce použitím roztoku octanu amonného, zředěné HCl, koncentrované HF a zředěné HNO_3. Minerální analýza studovaných vzorků uhlí a nedopalů prokázala přítomnost křemene, kaolinitu a slídy. Ve vzorcích uhlí lze rovněž předpokládat malé množství pyritu a v nedopalech i amorfní skelnou fázi. Měď se v hnědých uhlích vyskytovala především v sulfidických minerálech, v černém uhlí byla zjištěna i organická asociace. Při spalování docházelo k záchytu uvolněné mědi do amorfní skelné fáze. U niklu byla u uhlí zjištěna nejčastěji asociace s aluminosilikáty a sulfidickými minerály; během spalování docházelo k tvorbě málo rozpustných sloučenin niklu. Nejvyšší podíly chromu byly u uhlí i nedopalů zjištěny v pyritu, málo rozpustném chromitu či

vázaného na organickou hmotu. Dominantní výskyt kobaltu byl v aluminosilikátech a sulfidických minerálech. Olovo bylo vázáno především v sulfidických minerálech (galenit, pyrit) a aluminosilikátech. Arsen byl v hnědých uhlích nejvíce asociován s monosulfidy, arseničnany či oxidy rozpustnými v HCl. V černém uhlí také v pyritu a aluminosilikátech. Při spalování těchto uhlí došlo k záchytu As v aluminosilikátech a k tvorbě málo rozpustných sloučenin. Nejčastější forma výskytu Se u vzorků uhlí byla v pyritu, v aluminosilikátech a ve formě PbSe. U nedopalů dominoval výskyt Se v aluminosilikátech či málo rozpustných sloučeninách.

2Po06

SEKVENČNÍ EXTRAKCE HNĚDÝCH UHLÍ A NEDOPALŮ Z MALÝCH SPALOVACÍCH JEDNOTEK

Lucie Bartoňová, Zdeněk Klika

VŠB-Technická univerzita Ostrava, Tř. 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava - Poruba, CR
lucie.bartonova@vsb.cz

Tato práce je zaměřena na formy výskytu As, Se, Co, Cu, Pb, Cr a Ni ve vzorcích hnědých uhlí a z nich pocházejících nedopalů odebraných v pilotní spalovací jednotce simulující malá domácí topeniště. Formy výskytu těchto prvků byly stanoveny metodou sekvenční extrakce, kdy vzorky byly postupně louženy roztokem octanu amonného, HCl, HF a HNO_3. Prvková analýza vzorků uhlí (XRF) prokázala vysoké obsahy As v těchto vzorcích, minerální analýzou (XRD) byl v daných materiálech identifikován především křemen a kaolinit, u nedopalů také hematit, metakaolinit a dehydroxylovaný kaolinit. U Se byla zjištěna organická afinita, asociace s aluminosilikáty, pyritem a výskyt ve fromě PbSe. Ni byl vázán v sulfidických minerálech, málo rozpustných sloučeninách a aluminosilikátech. Cu byla v uhlích vázána především ve fromě monosulfidů, v nedopalech pak v důsledku jejich rozkladu spíše v aluminosilikátech a nerozpustných sloučeninách. U Cr převládala u uhlí i nedopalů přítomnost v nerozpustném zbytku po loužení odpovídající buď přímé organické asociaci nebo vazbě ve formě chromitu. Typ výskytu Co se velmi lišil pro jednotlivé vzorky, zjištěna byla asociace s aluminosilikáty, výskyt ve formě vyměnitelného kationtu i afinita k sulfidickým minerálům či nerozpustných sloučeninách. U As jednoznačně převládala u všech uhlí rozpustnost v HCl odpovídající jeho výskytu ve formě monosulfidů, oxidů či arseničnanů, v nedopalech pak byla zjištěna i jeho vazba s aluminosilikáty a v nerozpustných sločeninách. U Pb byla v uhlí typická především vazba v galenitu či pyritu, u nedopalů také v aluminosilikátech.

2Po07

PŘÍPRAVA NANOKOMPOZITŮ ε-Fe_2O_3/SiO_2 Z MOLEKULÁRNÍHO PREKURZORU METODOU SOL-GEL

Petr Brázda[1,3], Daniel Nižňanský[1,3], Petr Drahota[2], Sněžana Bakardjieva[3], Václav Tyrpekl[1,3], Jana Vejpravová[4]

[1]Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy, katedra anorganické chemie, Hlavova 2030, 128 40, Praha 2, Česká republika, petr.brazda@seznam.cz
[2]Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy, katedra geochemie, Albertov 6, 128 40, Praha 2, Česká republika
[3]Ústav anorganické chemie Akademie věd České republiky, 250 68, Řež, Česká republika
[4]Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy, katedra fyziky elektronových struktur, Ke Karlovu 5, 121 16, Praha 2, Česká republika

Materiály obsahující nanočástice oxidu železitého v matrici amorfního oxidu křemičitého jsou často studovaným nanokompozitem a to zejména díky svým zajímavým magnetickým vlastnostem. Díky nim jsou tyto materiály užívány jako kontrastní činidla pro zobrazování magnetickou rezonancí nebo nosiče léků. Také je lze využít pro magnetickou separaci a v katalýze.

Nanokompozit byl připraven hydrolýzou a kondenzací -$Si(OMe)_3$ skupin komplexu Fe^{3+} s bis-[3-(trimethoxysilyl)propylamidem] kyseliny ethylendiamintetraoctové následovanou žíháním na teploty v rozmezí 800 - 1000°C. Ligand byl charakterizován NMR spektroskopií. Nanokompozity byly studovány práškovou rentgenovou difrakcí, Mössbauerovou spektroskopií, rastrovací elektronovou mikroskopií, vysokorozlišovací transmisní elektronovou mikroskopií a EDX mikroanalýzou. Magnetické vlastnosti byly studovány měřením závislostí magnetizace na intenzitě vnějšího magnetického pole a AC susceptibilit v rozsahu 2 až 300 K. Jedinou fází oxidu železitého nalezenou v tomto nanokompozitu žíhaném na 1000°C byl ε-Fe_2O_3. Tato fáze je přechodovou fází mezi γ- a α-Fe_2O_3 a vykazuje velmi vysoké koercitivní pole (2 T) při pokojové teplotě. Podle našich znalostí byla v tak vysoké hmotnostní koncentraci (40% v matrici SiO_2) tato fáze připravena jako čistá poprvé. Studium magnetických vlastností potvrdilo, že ε-Fe_2O_3 přechází okolo 100 K z uspořádání CAF 1 (canted antiferromagnetic) do CAF 2. Použitím molekulárního prekurzoru bylo také docíleno zúžení distribuce velikosti nanočástic (průměr 90% částic je v intervalu 5 - 15 nm).

2Po08

REDUKCE WOLFRAMANOVÝCH PREKURZORŮ V PLAZMATU BUZENÉM VE SMĚSI VODÍKU A VHODNÉHO UHLOVODÍKU

Vlastimil Brožek, Marek Eliáš*, Jan Janča*

Ústav fyziky plazmatu AV ČR, Praha, e-mail: brozek@ipp.cas.cz
**Karedra fyzikální elektroniky, Masarykova Universita Brno, e-mail: jan92@physics.muni.cz*

Redukce wolframanů ve vodíkovém plazmatu vede k produkci wolframového prášku s vysokou slinovací aktivitou [1]. Redukce v plazmatu generovaném v prostředí plynných uhlovodíků vede ke vzniku katalyticky vysoce aktivních karbidů [2]. Velmi zajímavé je však chování látek, které vznikají reakcí plazmatu s kationtovou složkou wolframanů. Kromě wolframanu amonného byly z tohoto hlediska zkoumány wolframany sodné, vápenaté a olovnaté. Redukce v obou typech plazmatu mají aspekt jak kinetický, tak teplotní. Vliv jednotlivých forem plazmatu na redukce prekurzorů byl zkoumán z hlediska jeho generování v plazmochemických reaktorech s kapacitním nebo induktivním buzením a způsobu udržení výboje při různém pracovním příkonu. V první fázi redukce vznikají bertholidické wolframové bronzy, jejichž struktura a stechiometrický deficit byly konfrontovány s definicí jejich barevnosti metodou L*a*b*. V dalším stupni dochází k různým a rozdílným formám redukce kationtové složky, které jsou interpretovány z hlediska termodynamického i krystalochemického.

Experimentální práce jsou podporovány projektem GAČR č.104/05/0540 a VVZ MSM 0021622411

[1] Eliáš, M., Frgala, Z., Kudrle, V., Janča, *J., Brožek, V., J. Adv. Oxid. Technol., Vol. 7*, No 1, 91-97 (2004)
[2] Janča, J., Eliáš, M., Brožek, V., Frgala Z., Proc. 16th International Symposium on Plasma Chemistry, Taormina, Italy June 22-27, Po 10.17 (2003)

2Po09

POČÍTAČOVÁ SIMULÁCIA VODÍKOVÝCH VAZIEB PRE LEPŠIE POCHOPENIE ÚDAJOV TERMICKEJ ANALÝZY TAUMAZITU

Milan Drábik[1], Daniel Tunega[2, 3], Svetozár Balkovic[1], Vladimír Š. Fajnor[4]

[1] Ústav anorganickej chémie SAV, SK-845 36 Bratislava, uachmdra@savba.sk
[2] Austrian Research Centers Seibersdorf, A-2444 Seibersdorf, Austria, Daniel.Tunega@univie.ac.at
[3] Institute for Theoretical Chemistry, University of Vienna, A-1090 Vienna, Austria
[4] Katedra anorganickej chémie PRIF UK, SK-842 15 Bratislava, fajnor@fns.uniba.sk

Termický rozklad taumazitu $[Ca_3Si(OH)_6.12H_2O](CO_3)(SO_4)$ je stupňovitý proces a úzko súvisí s rozpadom vodíkových väzieb. Počítačová simulácia štruktúry je efektívny prostriedok ako potvrdiť alebo vyvrátiť indikované stupne reakcií rozkladu. Simulácie sa uskutočnili na kryštálovej štruktúre taumazitu, pričom dôraz bol položený na analýzu vodíkových väzieb, ktoré predstavujú dominantnú črtu štruktúry. Boli zistené štyri typy vodíkových väzieb: i) medzi molekulami vody a uhličitanovými iónmi, ii) medzi molekulami vody a síranovými iónmi, iii) medzi $Si(OH)_6^{2-}$ a molekulami vody a iv) medzi molekulami vody samotnými. Získané výsledky prispeli k vysvetleniu niektorých nejasností a komplexnosti termického rozkladu taumazitu v nízkoteplotnej oblasti 100 - 300 oC.

- Prvý stupeň predstavuje dehydratáciu a dehydroxyláciu skupiny $[Ca_3Si(OH)_6.12H_2O]^{4+}$ a kolaps štruktúry, ktorých výsledkom je tvorba medziproduktu s dvomi zostatkovými molekulami vody. Tieto molekuly vody a fragmenty štruktúry (SO_4^{2-}, CO_3^{2-}, SiO_3^{2-} a Ca^{2+} ióny) zostávajú vzájomne spojené vodíkovými väzbami. Následná dehydratácia medziproduktu je rozlíšená ako II. stupeň termického rozkladu. Navrhnutá je stechiometria:

I. $[Ca_3Si(OH)_6.12H_2O](CO_3)(SO_4) \xrightarrow{100\text{-}130\ C} [Ca_3SiO_3.2H_2O](CO_3)(SO_4) + 13H_2O$

II. $[Ca_3SiO_3.2H_2O](CO_3)(SO_4) \xrightarrow{<300\ C} Ca_3SiO_3CO_3SO_4 + 2H_2O$

- Údaje na TG-DTA krivkách o I. stupni sú natoľko citlivé a spoľahlivé, že ich je možné použiť na detekciu taumazit-síranového ataku v betónoch a z údajov na TG krivke stanoviť aj obsah taumazitu. Ukázali sme, že mólový zlomok taumazitu - x_{th}, je možné v napadnutých stavebných konštrukciách stanoviť nezávisle od citlivosti a presnosti termoanalytického prístroja. Aktuálna kvantitatívna citlivosť je blízka 1 % pre vysoko- citlivý a presný prístroj a 2 % pre prístroje zvyčajne používané v kontrolných laboratóriách.

Poďakovanie: Autori si dovoľujú vysloviť vďaku grantovej agentúre VEGA, projekt č. 5011 a výpočtovému stredisku viedenskej univerzity za poskytnutie výpočtového času v Linux-PC cluster Schrödinger II.

[1] J. Skalny, J. Marchand, I. Odler; *Sulfate Attack on Concrete*, (E & FN Spon, London, New York, 2002), Sections 4, 5 & 8.
[2] M. Drábik, D. Tunega, S. Balkovic, V.Š. Fajnor, *J. Therm. Anal. & Calor.*, zaslané do tlače.

2Po10

BIOLOGICKY AKTIVNÍ Fe(III) KOMPLEXY S CYTOKININOVÝMI DERIVÁTY

I. Popa[b], L. Dvořák[a], J. Mikulík[a], Z. Trávníček[a,b,*]

[a]Katedra anorganické chemie, Univerzita Palackého, Křížkovského 10, Olomouc CZ-771 47, Česká republika, email: trav@risc.upol.cz
[b]Laboratoř růstových regulátorů, Univerzita Palackého a Ústav experimentální botaniky AV ČR, Šlechtitelů 11, Olomouc CZ-783 71, Česká republika, email: popa@prfholnt.upol.cz

Práce je zaměřena na syntézu, charakteristiku a studium biologické aktivity (cytotoxicity a inhibice cyklin dependentních kináz) komplexních sloučenin železa(III) s deriváty 6-benzyl-aminopurinu (HL_a), N_6-benzyladenosinu (HL_b) a 6-benzylamino-9-isopropylpurinu (HL_c). Byly získány tyto typy komplexů: $[Fe(HL_a)Cl_3]\partial xH_2O$, $[Fe(H_2O)Cl_2(L_a)]\partial xH_2O$, $[Fe(HL_b)Cl_3]\partial xH_2O$, $[Fe(H_2O)Cl_2(L_b)]\partial xH_2O$, $[Fe(HL_c)Cl_3]\partial xH_2O$, kde x = 0-2. Sloučeniny byly charakterizovány chemickou analýzou prvků (CHN), IR, EPR, NMR a ^{57}Fe Mössbauerovou spektroskopií, magnetochemickými a vodivostními měřeními a termickou (TGA a DSC) analýzou. Z výsledků výše uvedených fyzikálních technik vyplývá, že ionty Fe(III) se nacházejí ve vysokospinovém uspořádání a jsou tetraedricky koordinovány. Dále bylo zjištěno, že ligand typu HL_a je koordinován na Fe(III) přes atom dusíku N_9 imidazolového kruhu, zatímco v případě ligandů HL_b a HL_c probíhá koordinace přes atom N_7. U komplexů byla studována jejich cytotoxicita na vybraných lidských nádorových liniích a inhibice cyklin-dependentních kináz. Vzájemný vztah mezi strukturou a biologickou aktivitou bude diskutován v rámci prezentace.

Autoři děkují za finanční podporu následujícím grantům: GA ČR (203/04/1168) a MŠMT (MSM 6198959218).

2Po11

PŘÍPRAVA, STRUKTURA A KATALYTICKÁ AKTIVITA HALOGENOSILYL(CYKLOPENTADIENYL) TITANIČITÝCH KOMPLEXŮ

Milan Erben[a], Jan Merna[b], Michal Dušek[a]

[a]Katedra obecné anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice, milan.erben@upce.cz;
[b] Vysoké učení technické v Brně, Ústav chemie materiálů, Purkyňova 118, 612 00 Brno

Byly připraveny metallocenové komplexy typu $(XSiMe_2)CpTiX_3$ (X = F, Cl, Br; Cp = C_5H_4) s reaktivní halogenosilylovou skupinou na cyklopentadienylovém kruhu. Reakcí těchto látek s ekvimolárním množstvím Li(*t*-BuNH) za přítomnosti triethylaminu vznikají sloučeniny tzv. CGC typu $[Ti(\eta^5{:}\eta^1\text{-}C_5H_4SiMe_2NBu^t)X_2]$, kde X je chlorid či bromid. Odpovídající fluoridový derivát tímto způsobem připravit nelze, avšak může být syntetizován z chloridového CGC komplexu reakcí s Me_3SnF v toluenu.

V CGC komplexech $[Ti(\eta^5{:}\eta^1\text{-}C_5H_4SiMe_2NBu^t)Cl_2]$ a $[Ti(\eta^5{:}\eta^1\text{-}C_5H_4SiMe_2NBu^t)Br_2]$ je koordinační okolí atomu titanu tvořeno středem Cp kruhu (C_g), atomem dusíku a dvěma halogenovými atomy. Pro tyto látky je charakteristická přítomnost napjatého cyklu Ti-N-Si-C_g. Atom dusíku je *sp*^{2} hybridizován a vazby N-Ti, N-Si a N-C leží v jedné rovinně. Planaritu vazeb v okolí atomu dusíku lze vysvětlit značným π-příspěvkem N →Ti za vzniku dvojné vazby dusík-titan. Sloučenina $(FSiMe_2)CpTiF_3$ tvoří v pevné fázi pentamerní jednotky s fluoridovými můstky, v nichž tři z pěti atomů titanu vykazují deformovanou oktaedrickou koordinaci, zatímco zbylé dva atomy titanu jsou pentakoordinovány s tvarem deformované tetragonální pyramidy [2, 3].

Katalytická aktivita připravených sloučenin byla testována na systému styrenu-methylaluminoxan a bylo zjištěno, že CGC komplexy nejsou pro polymerace styrenu aktivní. Komplex $(FSiMe_2)CpTiF_3$ vykazoval vysokou katalytickou aktivitu (2923 kg PS/mol$_{Ti}$/mol$_{styrenu}$/h), což je hodnota téměř o 30% vyšší, než jaká byla zjištěna u komerčně používané sloučeniny $CpTiCl_3$. Zajímavé je, že této aktivity bylo dosaženo již při relativně nízké koncentraci methylaluminoxanu (Al:Ti = 800), který svoji vysokou cenou určuje i výslednou cenu syndiotaktického polystyrenu.

[1] Práce je financována v rámci výzkumného záměru VZ 0021627501 (MŠMT ČR).
[2] Erben M, Císařová I, Vinklárek J, Dušek M, *Acta Cryst., E61*, m50-m51 (2005).
[3] Dušek M, *Diplomová práce*, Univerzita Pardubice (2005).

2Po12

SELEKTIVNÍ LEPTÁNÍ CHALKOGENIDOVÝCH VRSTEV A JEHO PRAKTICKÉ APLIKACE

Alena Fišerová[1], Miroslav Vlček[1], Himanshu Jain[2]

[1]Katedra obecné a anorganické chemie, Univerzita Pardubice, 53210 Pardubice
[2] International Materials Institute for New Functionality in Glass, Lehigh University, Bethlehem, PA, 18015, USA, alena.fiserova@seznam.cz

V práci byly studovány fotoindukované změny chemické rezistence tenkých vrstev amorfních chalkogenidů, indukované širokospektrální halogenovou lampou (6mW/cm^2, IR-cut off filter) a monochromatickým zářením Ar laseru. Objemové vzorky byly připraveny přímou syntézou z prvků polovodičové čistoty. Z nich byly dále připraveny metodou vakuového napařování tenké vrstvy o

tloušťce 300 - 1000 nm. Bylo prokázáno, že expozice výše uvedenými zdroji indukuje poměrně výrazné změny rychlosti rozpouštění v nevodných alkalických roztocích aminů (např. etylendiamin, trietylamin, propylamin, n-butylamin). Expozice indukuje zpomalení rychlosti rozpouštění a při expozici např. přes chromovou masku je tak získán negativní obraz předlohy. Vyšší selektivity leptání bylo dosaženo zejména u sulfidů a selenidů arsenu. Vrstvy na bázi sulfidů a selenidů germania vykazovaly obecně menší selektivitu leptání. Toto zjištění je v dobré shodě s našimi dřívějšími výsledky studia fotoindukovaných změn optických vlastností chalkogenidových vrstev. Jak potvrdily výsledky studia Ramanových spekter, jsou expozicí indukované změny struktury v tenkých vrstvách chalkogenidů As signifikantnější, což vede i k výraznějším změnám v rychlosti leptání neexponovaných a exponovaných vrstev. Větší flexibilita vrstev je dána nižší hodnotou koordinačního čísla As a s tím spojené menší kompaktnosti skelné matrice. Uvedeného jevu bylo využito pro tvorbu difrakčních mřížek expozicí přes masku a holografickou cestou. Byla proměřena difrakční účinnost připravených mřížek.

Poděkování: Práce byla provedena za finanční podpory projektu MŠMT ČR VZ 00216 27501

2Po13

IMPEDANCE PROPERTIES OF TIN DIOXIDE-TIN ACETYLACETONATE THIN FILMS

Fitl P. [1], Myslík V[1]., Vrňata M[2]., Komenda V[1]., Fryček R.[1]

[1] Department of Solid State Engineering, Institute of Chemical Technology, Prague 6, 166 28 Czech Republic, fitlp@vscht.cz
[2] Department of Physics, Institute of Chemical Technology, Prague 6, 166 28 Czech Republic

This work is focused on the investigation of AC parameters of thin films prepared by pulsed laser deposition from tin dioxide-tin acetylacetonate targets. Thin films based on a mixture of these two materials show very high DC sensitivity on low concentrations of hydrogen (and other reduction gases) at low temperatures (temperatures under 200°C). In our work different weight ratios of tin acetylacetonate and tin dioxide were used for the preparation of the targets for pulsed laser deposition [1].

The main goal of this work is given to the investigation of AC parameters especially phase angle sensitivity, which seems to be very suitable parameter for the characterization of these films in chemical sensing devices. The phase angle sensitivity was defined in previous published work [2]. The impedance measurements are carried out on impedance analyzer (HP 4192LF) in frequency range 10 Hz - 13 MHz and amplitude of testing signal not exceeding 50 mV in two-wire connection. The samples with best composition have the maximum of phase angle sensitivity at frequencies in range from 500 kHz to 1 MHz.

The surface of samples was also investigated with scanning electron microscopy and atomic force microscopy. It was found that samples prepared from mixture of these two materials have special microstructure.

[1] MYSLÍK, V, VRŇATA, M, VYSLOUŽIL, F., JELÍNEK, M., NOVOTNÁ, M., Pulsed-laser deposition of metal acetylacetonates for sensor devices, *J.Appl. Polym. Sci.*, 1999,Vol. 74, pp. 1614-1622.
[2] KOVANDA, M., MYSLÍK, V., VRŇATA, M., ROZEHNAL, Z., VYSLOUŽIL, F., FITL, P. Electrical properties of SnO2 and SnAcAc based gas sensors - DC and AC measurements, *Solid State Phenomena*, 2003, Vols.90-91, p.547-552.

2Po14

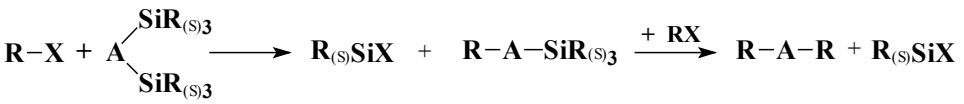
NOVÉ DERIVÁTY LINEÁRNÍCH FOSFAZENŮ OBSAHUJÍCÍ SKELETARNÍ STRUKTURU S-N=P-N(H)-SI, PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE

K. Fojtlová, J. Taraba

Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova Univerzita Brno, Kotlářská 2, 611 37 Brno, taraba@chemi.muni.cz

V současnosti se v celé oblasti chemie projevuje stále větší snaha o syntézu nových derivátů doposud známých látek a to platí i pro sloučeniny fosforu, dusíku a síry. Lineární fosfazeny jsou jednou z významných anorganických dusíko-fosforečných sloučenin obecného vzorce $X_3P{=}N{-}R$. N-konec molekuly může být modifikován navázáním derivátů kyseliny sírové v podobě $-SO_2R$ skupiny. PX_3 skupina ve struktuře lineárního fosfazenu může snadno podléhat nukleofilním substitucím, při kterých vznikají například reakcí se silylačními činidly příslušné silyl-deriváty.

Silylační činidla jsou látky obsahující ve struktuře -SiR3 skupinu, která ochotně vstupuje do silylačních reakcí. Produkty takto vzniklých silyl-derivátů pak mohou podlehnout desilylační reakci za vzniku nových sloučenin.



A = NH, N(Me), CO...

V našem případě jsme jako silylační činidlo použili hexamethyldisilazan (HMDSA). Jako reakční partner pro HMDSA byl v námi provedených reakcích použit na S-

konci CF_3 skupinou blokovaný lineární monofosfazen[1] ($CF_3SO_2N=PCl_3$). Při studiu této problematiky jsme vycházeli ze známých skutečností získaných při studiu reakcí $ClSO_2N=PCl_3$ s HMDSA.[2] V reakci lineárního fosfazenu s neblokovaným S-koncem vzniká v první fázi lineární mono(trimethylsilylamino)derivát a v následné reakci s rozpouštědlem (MeCN) podléhá cyklizaci za vzniku heterocyklického produktu.[3] Vzhledem k modifikaci výchozího fosfazenu byl v našem případě při reakci s HMDSA pozorován vznik nových a v literatuře dosud nepopsaných di a tri(trimethylsilylamino)derivátů. Molekulová struktura produktů byla prokázána na základě měření IČ, RA, ^{1}H-NMR, ^{13}C-NMR, ^{19}F-NMR a rtg. strukturní analýzy.

Poděkování: Děkuji Grantové agentuře České Republiky za finanční podporu tohoto projektu. Číslo registrace grantu: 203/05/P104

[1] H. W. Roesky, G .Holtschneider, H .H. Giere, *Z. Naturfosch.* ***25*** B, 252-254, (1970)
[2] Z. Žák, M. Vlčková, L. Frölihová, *Main. Group. Chem.* ***2***, 155-160, (1997)
[3] Z. Žák, J. Taraba, *Phosph., Sulf., and Sil.,* ***179***, 839-843, (2004)

2Po15

MORFOLOGIE ETTRINGITU

Vítězslav Frank, Jaromír Havlica

Ústav chemie materiálů, Fakulta chemická VUT v Brně, Purkyňova 118, 61200 Brno, frank@fch.vutbr.cz

Prezentovaný příspěvek se zabývá přípravou ettringitu ze síranu amonno-hlinitého, který vyrábí podnik DIAMO, s. p. ve Stráži pod Ralskem jako produkt sanace po chemické těžbě uranu, a suspenze $Ca(OH)_2$, resp. hašeného vápna. Fázová analýza pevného produktu byla stanovena metodou rtg. práškové analýzy, morfologie produktu byla studována pomocí SEM mikroskopie.

Během reakce se uvolňuje ze struktury síranu amoniak a proto byl také sledován vliv amoniaku na fázové složení, resp. morfologii produktů.

Ve všech vzorcích byly zastoupeny dvě fáze, a to ettringit a sádrovec. Morfologie byla proměnná a byl nalezen vztah mezi morfologií připravených krystalů a hmotnostním poměrem výchozích látek.

Vzhledem k dosti proměnlivému fázovému složení a zejména pak morfologii vzorků, není možno získaný produkt využít tam, kde je nutné dbát na jeho složení (např. plniva do plastů, úprava půd, použití v oblasti imobilizace toxických kovů ze ŽP). Navržené oblasti možného využití získaného produktu jsou proto tyto:

- stavitelství silnic (např. jako podložní materiál, drenážní vrstva, základy),
- sanace dolů (např. jako výplň vytěžených prostor),
- stavebnictví (např. výroba odlehčených desek, jako možná alternativa k energosádrovci).

2Po16

INFLUENCE OF RARE EARTH ADMIXTURES ON GROWTH RATE OF InP LAYERS

J. Grym, O. Procházková, F. Šrobár

Institute of Radio Engineering and Electronics, Academy of Sciences of the Czech Republic, Chaberská 57, 182 51 Praha 8, Czechia, grym@ure.cas.cz

Elements of the lanthanide family, when present in the growth solution, are usually not incorporated into lattice but are known to have purifying effect on crystals of AIIIBV compounds. This is due to easy reaction with common contaminants forming shallow levels in the energy gap. As a side effect, they can also change the growth rate, probably by taking part in the surface migration and adhesion processes or by depleting of growth units the Volmer layer of the solution due to formation of insoluble compounds.

In continuation of our previous work [1], we study influence of praseodymium, neodymium, and dysprosium on growth kinetics of InP LPE layers. Scanning electron microscopy and Nomarski-contrast optical microscopy are employed to establish layer thicknesses. The growth rate versus supersaturation data are fitted using modified Burton-Cabrera-Frank theory [2] in conjunction with a diagrammatic analysis that reveals the importance of nonlinearity and of negative feedback mechanisms involving negative growth rate-dependent contribution to the effective supersaturation. Contrary to common belief, various rare earth elements are shown to differ significantly in their effects on the layer growth rate. The layer growth data will be supplemented by measurements of some transport properties.

Acknowledgment. Work supported by Grant Agency of the Czech Republic, project No. 102/03/0379.

[1] F. Šrobár, and O. Procházková, Proc. 5th Int. Conf. on Advanced Semicond. Devices and Microsystems, Smolenice, Slovakia 2004 (J. Osvald and Š. Haščík, Eds.), pp. 65-68.
[2] W. K. Burton, N. Cabrera, and F. C. Frank, Phil. Trans. Roy. Soc. London A243, 299-321, (1951).

2Po17

EXTRAKCE 6-SULFATOXYMELATONINU NA PEVNÉ FÁZI

Michaela Hamerníková, Karla Klimánková, Olga Koubská, Alžběta Marešková, Veronika Košíková

Farmaceutická fakulta UK, Katedra biofyziky a fyzikální chemie, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, hamernikova@faf.cuni.cz

Melatonin-hlavní hormon epifýzy- je látkou řídící biorytmy živočichů. Je zkoumána jeho role v endokrinním systému a v procesu stárnutí organismu. V krevní plazmě

jsou jeho hladiny stopové (pg/ml), což komplikuje jeho stanovení. Výhodnější je stanovení jeho hlavního metabolitu 6-sulfatoxymelatoninu (SAMT) v moči. Jsou popisovány především metody radioimunologické [1], rovněž byla popsána GC-MS [2]. Na našem pracovišti se zaměřujeme na HPLC resp. CE, čemuž předchází čištění vzorku moči pomocí SPE. Silné organické kyseliny nelze kvůli nedostatečné retenci extrahovat na reverzních pevných fázích. Cílem této práce je porovnat iontopárovou extrakci SAMT z moči na reverzní fázi s extrakcí SAMT na anexech. Byla vyzkoušena iontopárová SPE na C18 a kyanopropylové pevné fázi s využitím tetrabutylamonium hydrogensulfátu jako iontopárového činidla. Při práci se standardem se metoda osvědčila, ale při extrakci z moči se ukázala jako málo selektivní.

Na slabém anexu (aminopropylové fázi) se opět dařilo reprodukovatelně extrahovat standard z vodného roztoku, ale při extrakci z moči se výrazně snižovala retence SAMT, což se dá vysvětlit přítomností mnoha kyselin přítomných v moči a podobným mechanismem jejich retence a eluce. Na silném anexu Supelco DSC SAX dochází k retenci SAMT jak z vodného roztoku SAMT, tak z moči. Eluce lze dosáhnout roztokem síranu sodného. Tento způsob bude dále studován a použit při úpravě vzorku před HPLC a CE analýzou.

[1] Zimmerman R. C., Schroder S., Baars S., Schumacher M., Weise H. C.: *Fertil. Steril. 54*,612-618 (1990).
[2] Fellenberg A.J., Phillipous G., Seamark R.F.: *Biomed. Mass. Spectrom.* 7, 84-87 (1980).

2Po18

ŠTÚDIUM KOLOIDNÝCH ROZTOKOV STRIEBRA

Miroslava Holecová, Aleš Panáček, Taťjana Nevěčná, Libor Kvítek

Katedra fyzikální chemie PřF UP Olomouc,
Třída Svobody 8, 771 46,
mholecova@hotmail.com

Jednou z neoddeliteľných zložiek fyzikálnej chémie je aj koloidná resp. materiálová chémia zaoberajúca sa štúdiom koloidných roztokov, ich prípravou, stabilizáciou a vzhľadom na ich vhodné chemické, fyzikálne a biologické vlastnosti aj doležitým uplatnením v čo najširšom zábere jednotlivých oblastí života (napr. v elektrotechnickom priemysle, v medicíne, vo vede, výskume apod.).

Koloidné roztoky, ktorým sa tento príspevok venuje, sú roztoky nanočastíc striebra, ktoré je v aplikačných oblastiach veľmi rozšíreným kovom (napr. v povrchom zosilenej Ramanovej spektroskopii). Jednou z kľúčových úloh v tejto oblasti výskumu je vývoj metód prípravy, ktoré by umožňovali cielene ovplyvňovať veľkosť a morfológiu pripravovaných častíc. Preto je táto štúdia venovaná možnostiam ovplyvnenia veľkosti koloidných častíc striebra pripravovaných chemickou redukciou strieborných iónov vo vodnom prostredí. Ako redukčné činidlo používame roztok glukózy (popr. iných cukrov ako sacharóza, xylóza, maltóza apod.), pričom strieborný ión je viazaný do komplexu $Ag(NH_3)_2^+$. Samotný amoniak potom predstavuje premennú, ktorá ovplyvňuje veľkosť častíc. Ďalším faktorom, ktorý ju ovplyvňuje, je aj faktor pH. So zvyšujúcou sa koncentráciou amoniaku a zvyšujúcim sa pH sa veľkosť častíc zväčšuje. V študovanej oblasti pH (v rozmedzí 11,3 až 13,2) a pri použitých koncentráciách amoniaku (0,005M až 0,2M) sa podarilo pripraviť nanočastice striebra s regulovateľnou veľkosťou približne 40 - 440 nm.

2Po19

CARBABORANE CHEMISTRY THE PREPARATION OF SOME HALOGEN DERIVATIVES OF nido-DI- AND TRICARBABORANES

Josef Holub, Mario Bakardjiev, Bohumil Štíbr

Institute of Inorganic Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic CZ-250 68 Řež, the Czech Republic, holub@iic.cas.cz

The reaction between *nido*-5,6-$C_2B_8H_{12}$[1] and elemental iodine in benzene, using the $AlCl_3$ catalyst, led to the formation of 7-I-*nido*-5,6-$C_2B_8H_{11}$. The bromination method ($Br_2/AlBr_3/CS_2$) gave a mixture of 7-Br-*nido*-5,6-$C_2B_8H_{11}$ and 4,7-Br_2-*nido*-5,6-$C_2B_8H_{10}$.

The reaction of *nido*-5,6-$C_2B_8H_{12}$ with CCl_4 in the presence of $AlCl_3$ at room temperature led to a mixture of mono- and disubstituted derivatives, while the same reaction at elevated temperature afforded trisubstituted derivative 3,4,7-Cl_3-*nido*-5,6-$C_2B_8H_9$ only.

The reaction between dicarbaborane 7-I-*nido*-5,6-$C_2B_8H_{11}$ and ^{t}BuNC in CH_2Cl_2 in the presence of PS (PS = 1,8-Bis-(dimethylamino)naphthalene) resulted in the isolation of the eleven-vertex *nido* tricarbaborane 3-I-7-^{t}BuNH$_2$-nido-7,8,9-$C_3B_8H_9$. This compound can be used for the development of tricarbollide and metallatricarbollide chemistry.

The mixtures of the halogen derivatives were separated by column chromatography on silica gel. Individual compounds were characterized by mass spectroscopy and multinuclear (^{11}B, ^{1}H and ^{13}C) spectroscopy combined with two-dimensional [^{11}B-^{11}B]-COSY NMR techniques.

The work was supported by the Grant Agency of the Czech Republic (project 203/05/2646) and Ministry of Education of the Czech Republic (project LC523).

[1] B. Štíbr, J. Holub, T. Jelínek, B. Grüner, J. Fusek, Z. Plzák, F. Teixidor, C. Vinas, J. D. Kennedy, *Collect. Czech. Chem. Commun.*, 62, 1229-1238, (1997).

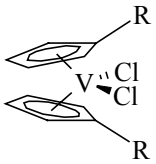
2Po20

SYNTHESIS OF RING-SUBSTITUTED VANADOCENE(IV) COMPLEXES [1]

Jan Honzíček[a], Irena Krutišová [a], Ivana Císařová[b]
Jaromír Vinklárek[a]

[a] Department of General and Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice, e-mail: hohonza@post.cz
[b] Department of Inorganic Chemistry, Charles University, Hlavova 2030, 128 40 Praha 2, Czech Republic

Bent metallocene complexes of the type Cp_2MX_2 (M = early transition metal; X = halide or pseudohalide) are well known as a potent cancerostatic and catalytic active compounds. Currently, there is the considerable effort to enhance their activity through modification of Cp ring. Although a lot of ring-substituted group IV metallocenes was synthesized in recent years, only few of group V compounds is known.



The ring-substituted vanadocene(IV) complexes $(RCp)_2VCl_2$ (i-Pr, *o*-$CH_2C_6H_4OMe$, *p*-$CH_2C_6H_4OMe$, $CH(CH_2)_4NMe$) and $(MeN(CH_2)_4CHCp)_2V(NCO)_2$ were prepared by route that was previously used for synthesis of ansa-vanadocene complexes.[2] These compounds were characterized by spectroscopic methods (IR, Raman, EPR). The structures of $(p\text{-}MeOC_6H_4CH_2)_2VCl_2$ and $(MeN(CH_2)_4CHCp)_2V(NCO)_2$ were determined by X-ray diffraction analysis.

The modification of vanadocene(IV) complexes on Cp rings lead to significantly different solubility in water and organic solvents. Especially, the largely enhanced water solubility of amino-functionalized compounds might result in better and more controllable biological activity.

[1] Research Project No. VZ 0021627501 and Grant GACR 203/05/H001.
[2] J. Honzíček, H. Paláčková, I. Císařová and J. Vinklárek, *J. Organomet. Chem.* (submitted).

2Po21

VÝZKUM A VÝVOJ TECHNOLOGIE ALFA MODIFIKACE HEMIHYDRÁTU SÍRANU VÁPENATÉHO

Lukáš Hora[a], Pavel Wagner[b], František Škvára[c]

[a]Výzkumný ústav anorganické chemie, a. s., Revoluční 84, Ústí nad Labem, ČR, lukas.hora@vuanch.cz;
[b]Gypstrend, s. o. r., Kobeřice, ČR, info@gypstrend.cz,
[c]Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, Praha,ČR, skvaraf@vscht.cz

Sádrovce v České republice produkují chemické a sklářské provozy většinou při neutralizaci kyseliny sírové a tepelné elektrárny při mokrém způsobu odsiřování spalin. Většina produkce sádrovců není v současné době efektivně využívána.

Cílem projektu bylo vyvinou technologii výroby alfa sádry s co nejlepšími užitnými vlastnostmi, ze které budou připravovány sádrové výrobky vysoké kvality.

Zaměřili jsme se na dva způsoby přípravy alfa sádry - tlakový způsob v autoklávu a beztlakový způsob v roztoku solí. V autoklávu jsme připravovali alfa sádru ve vodní suspenzi sádrovce i v prostředí nasycené vodní páry, při beztlakovém způsobu byl použit směsný roztok solí $CaCl_2$, $MgCl_2$ a KCl.

Klíčových parametrů výrazně ovlivňujících vznik alfa sádry je poměrně hodně a velmi závisí na původu výchozího sádrovce. Jedná se především o reakční teplotu, použití a způsob aplikace vhodného aditiva, ale také koncentraci suspenze sádrovce.

Vyhodnocování jednotlivých experimentů jsme prováděli pomocí mikroskopických metod, spojených s počítačovou analýzou obrazu. Vznik hemihydrátu byl ověřován RTG spektrální analýzou. Dále jsme sledovali chování vyrobené alfa sádry při zpracování na sádrové odlitky pomocí modifikovaných normovaných metod. Byly sledován zejména proces přípravy sádrové kaše a mechanické vlastnosti sádrových odlitků.

Nejkvalitnější alfa sádry dosahovali po zpracování na odlitky pevností v tlaku až 50 MPa při použití vodního součinitele 0,27.

Tato práce vznikla s podporou grantu MPO ČR ev. č. FF-P/072.

2Po22

VLIV PŘÍDAVKU La_2O_3 NA CHEMICKOU ODOLNOST SKEL URČENÝCH PRO DENTÁLNÍ APLIKACE

Helena Hradecká, Zoja Guschlová, Aleš Helebrant

Ústav skla a keramiky VŠCHT v Praze, Technická 5, Praha 6, Helena.Hradecka@vscht.cz

Skloionomerní cementy (GICs) využívané v dentální praxi jsou směsí jemně mletého fluorohlinitokřemičitého skla a vodného roztoku polykarboxylové kyseliny [1].

Z důvodu dobré RTG-kontrastnosti cementu jsou do základního skla pro GICs přidávány oxidy Ba, Sr a nově i La [2]. V ústech může při styku s některými potravinami a nápoji docházet ke zvýšené korozi GICs, která je dána především chemickou odolností samotného skla. V předložené práci byla sledována koroze skel s obsahem La_2O_3 0 a 8 hm.% do vybraných loužících roztoků v rozmezí pH 2-9. Modelová loužení skel probíhala v prostředí destilované vody, vodných roztoků KOH (pH=9), HCl (pH=2-4), kyseliny citronové a mléčné (pH=2,5) při 37oC. Ve výluzích byla stanovena koncentrace Si, Al, Na, Ca a La metodou AAS. Výsledky ukázaly, že v destilované vodě, zásaditém prostředí a v HCl (pH=4) k rozpouštění skel nedochází. Naopak v kyselém prostředí (pH=2,5) docházelo k rozpouštění obou typů skel - v HCl k mírnějšímu, v prostředí organických kyselin k vysokému. Přídavek La_2O_3 (8 hm.%) výrazně snižoval rozpouštění skla v prostředí anorganických i organických kyselin.

Práce byla řešena jako součást výzkumného záměru MSM 6046137302 Příprava a výzkum funkčních materiálů a materiálových technologií s využitím mikro- a nanoskopických metod.

[1] Davidson C. L., Mjör I. A.: Advences in glass-ionomer cements, Quintessence Publishing, Chicago (1999)
[2] Nevšímalová M.: Diplomová práce, VŠCHT Praha (2002)

2Po23

ŠTĚRBINOVÁ KOROZE V PODMÍNKÁCH PWR PAROGENERÁTORŮ

Hubičková M., Novotný P., Sajdl P.

Ústav Energetiky, FTOP, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6
marie.hubickova@vscht.cz

Lokalizovaná koroze parogenerátoru v PWR je vážným problémem limitujícím jeho životnost. Zejména se jedná o nebezpečí rozvoje trhlin iniciovaných ve štěrbinách. Prezentovaná práce se zabývá možnostmi testování korozních procesů ve štěrbinách za vysokých tlaků a teplot. Experimenty probíhaly v autoklávu ve vodném prostředí s přídavkem NaCl při 290°C. Vzorky byly vytvořeny z austenitické oceli 08CH18N10T. Při experimentech zaměřených na zjištění optimální šířky štěrbiny a rozložení jednotlivých pásem uvnitř štěrbiny byl ve vzorcích vyrobených z materiálu závitového hnízda zjištěn podíl magnetické fáze. Ta se po expozici projevila výskytem kontrastních linií na povrchu kovu, které vykazují charakter ústí krátkých trhlin. Další experimenty byly tedy zaměřené na zjištění materiálových a mechanických vlastností závitového hnízda odlišných od vlastností ostatních vzorků oceli. Materiály byly podrobeny deformačním tahovým zkouškám, testování povrchu za použití magneto-optické metody a zjištění chemického složení povrchu metodou XPS.

2Po24

TERMICKÉ VLASTNOSTI FLUOROPEROXOKOMPLEXOV $Cs_3[V_2O_3(O_2)_3F_3] \cdot 3H_2O$ A $Cs_3[V_2O_2(O_2)_4F] \cdot H_2O$

Jana Chrappová, P. Schwendt

Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava 4, chrappova@fns.uniba.sk

V tejto práci sme sledovali termické vlastnosti komplexov $Cs_3[V_2O_2(O_2)_3F_3] \cdot 3H_2O$ a $Cs_3[V_2O_2(O_2)_4F] \cdot H_2O$ pomocou metód DTA, TG, DTG a DSC do 500 °C.

Termický rozklad $Cs_3[V_2O_2(O_2)_3F_3] \cdot 3H_2O$ prebieha v dvoch stupňoch, podobne ako v publikovanom termickom rozklade $K_3[V_2O_2(O_2)_3F_3] \cdot HF \cdot 2H_2O$ [1]. V prvom stupni sa uvolňujú dve molekuly H_2O (t_{max} 75 °C, endoefekt), následne ďalšia molekula vody (t_{max} 96 °C, endoefekt). Postupné uvolňovanie molekúl vody bolo potvrdené aj izotermickým rozkladom uvedeného komplexu pri laboratórnej teplote. Ďalší stupeň zodpovedá uvolňovaniu peroxidového kyslíka v dvoch na seba nadväzujúcich dejoch (exotermické píky s t_{max} pri 141 a 196 °C). Výsledným produktom rozkladu je zmes $CsVO_3$ a $Cs_2[VO_2F_3]$.

Pri termickom rozklade $Cs_3[V_2O_2(O_2)_4F] \cdot H_2O$ najskôr dochádza k dehydratácii látky s čiastočným uvolňovaním peroxidového kyslíka (t_{max} 114 °C, exoefekt). V ďalších dvoch krokoch sa postupne uvoľňuje zostávajúci peroxidový kyslík (t_{max} 137 a 193 °C, exoefekty). Výsledným produktom rozkladu je zmes $CsVO_3$ a CsF v pomere 2 : 1.

Výskum bol podporený grantmi MŠ SR VEGA č. 1/1375/04 a UK/255/2005.

[1] Schwendt P., Joniaková D., *Termochim. Acta, 68*, 297 (1985)

2Po25

VLIV RELATIVNÍ VLHKOSTI NA PRŮBĚH KARBONATACE BETONU

Markéta Chromá

Ústav chemie FAST VUT v Brně, Žižkova 17, 602 00 Brno, e-mail: chroma.m@fce.vutbr.cz

Pravděpodobně nejzávažnějším typem degradace betonových konstrukcí je koroze ocelové výztuže, která je nejčastěji způsobena karbonatací betonu vedoucí ke snížení pH a následné depasivaci výztuže. Tento jev závisí na velkém množství parametrů, přičemž okolní prostředí ovlivňuje karbonataci především koncentrací CO_2 a relativní vlhkostí. Zjištění vlivu relativní vlhkosti na průběh karbonatace, který je v literatuře rozdílně interpretován [1-3], je velmi důležité pro zvýšení objektivity při navrhování betonových konstrukcí.

Zkušební tělesa o velikosti 40x40x160 mm byla zhotovena z betonové směsi obsahující CEM I 42,5 R,

kamenivo s granulometrií 0/4 mm a 4/8 mm a vodu (w/c = 0,42) a rovněž ze směsi s přídavkem plastifikátoru melaminového typu FM 350 (w/c = 0,25). Po 1 dni byla zatvrdlá zkušební tělesa vyjmuta z forem, uložena na 28 dní do vody a po následném stanovení pevnosti v tlaku a v tahu za ohybu vložena do exsikátorů naplněných CO2. Různá relativní vlhkost v jednotlivých exsikátorech byla zajištěna přítomností nasycených roztoků různých solí. Po 10, 32, 60, 90, 120 a 150 dnech byla pomocí ethanolického roztoku fenolftaleinu stanovena hloubka karbonatace v jednotlivých prostředích.

Z výsledků se podařilo zjistit, že průběh karbonatace betonu je nejvíce ovlivňován relativní vlhkostí vzduchu (RH) v rozmezí 70-90 %, přičemž karbonatace postupuje nejrychleji při RH = 85 %. Ze získaných výsledků rovněž vyplynulo, že v přítomnosti plastifikátoru dochází k výraznému zpomalení postupu karbonatace, což je pravděpodobně způsobeno vyššími počátečními pevnostmi a menším průměrem pórů daného betonu.

Příspěvek byl finančně podpořen grantem GA ČR 103/03/1350.

[1] Papadakis, V. G.; Fardis, M. N.; Vayenas, C. G. *Materials and Structures, Vol. 25*, 1992, 293-304.
[2] Matoušek, M. *Ph.D. Thesis*, FCE, Brno University of Technology, Czech Republic, 1977.
[3] Roy, S. K.; Poh, K. B.; Northwood, D. O. *Building and Environment, Vol. 34*, 1999, 597-606.

2Po26

HYDROGEN BRIDGES IN CRYSTALL ENGINEERING

R. Ivaniková[a], I. Svoboda[b], A. Mašlejová[a], B. Papánková[a], H. Fuess[b]

[a]Department of Inorganic Chemistry, Slovak University of Technology, SK - 812 37 Bratislava
[b]Institut for Materials Science, Darmstadt University of Technology, D - 64289 Darmstadt, Germany
e-mail: radoslava.ivanikova@stuba.sk

Supramolecular architectures derived from metallic complexes as building blocs are an attractive focus of current research. In this context coordinative interactions and /or hydrogen bonds have been extensively used to produce supramolecular one-, two- or three-dimensional polymeric structures. The nature of metal, counterions or ligands are factors that can be modulated to determine the molecular assembly. In recent years, we have investigated the coordination chemistry of metal complexes with N-containing heterocyclic derivatives and carboxylate ion [1, 2]. In previous work from our lab we have made use of hydrogen/bonding interactions produced between cationic metal complexes containing imidazole and pyrazole ligands and the corresponding counterions.

Although the strong N-H…X (X=O atoms from carboxylate counterions) hydrogen bonds are the predominant force driving the structure, other different intermolecular interactions, such as C-H…O, are also considered to be important for the molecular assembly [3].

We have now extended these results to the use of new nickel(II) and cobalt(II) imidazole derivatives of the type containing different counterions, as well as different substituents on the imidazole rings.

The solid coordination compounds are: $Ni(iz)_6(HCOO)_2$, $Co(iz)_6(HCOO)_2$, $Ni(2\text{-metyliz})_2(H_2O)_2(HCOO)_2$, $Ni(1,2\text{-dimeiz})_2(CH_3COO)_2$, $Ni(iz)_6(CH_3CHClCOO)_2$.The related complex containing a pyrazole ligand has also been prepared and studied. We report herein how the presence of strong or weak N-H…O and C-H…O inter and intramolecular hydrogen-bonding interactions, supported by different counterions, are responsible for the molecular arrangement in the solid for complexes with the imidazole ligand.

[1] A. Mašlejová , R. Boča, Ľ. Dlháň , B. Papánková, I.Svoboda and H. Fuess, *Chem. Phys. Lett. 347*(4-6), 397 - 402, (2001)
[2] R. Boča. L. Dlháň, W. Haase, R. Herchel, A. Mašlejová, B. Papánková, *Chem. Phys. Lett. 373*, 402-410, (2003)
[3] R. M. Claramunt, P. Cornago, M. Cano, J. V. Heras, M. L. Gallego, E. Pinilla and M. R. Torres, *Eur. J. Inorg. Chem.* 2693, (2003)

2Po27

PŘÍPRAVA SUPRAVODIČE Bi-2223 S ČÁSTEČNOU SUBSTITUCÍ KYSLÍKU FLUOREM

Jakeš Vít, Sýkorová Dagmar, Smrčková Olga

VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha, Česká republika
e-mail: jakesv@vscht.cz

Systém Bi-Sr-Ca-Cu-O obsahuje levné a netoxické prvky, což je výhodné pro jeho technické aplikace. V tomto systému byly identifikovány tři supravodivé fáze obecného stechiometrického složení $Bi_2Sr_2Ca_{n-1}Cu_nO_{2n+4}$. S rostoucím n vzrůstá kritická teplota T_c až na T_c = 110 K pro n = 3 (tzv. fáze Bi-2223). Supravodivé vlastnosti této fáze v polykrystalických vzorcích (např. kritická proudová hustota) nicméně nejsou uspokojivé a vědci stále hledají způsoby, jak je zlepšit. Perspektivní metodou je substituce nebo adice dalšího prvku do vzorku. Tento prvek může například vytvořit novou fázi s nízkým bodem tání a tím podpořit kinetiku reakce v pevné fázi a tvorbu supravodivé fáze nebo může modifikovat supravodivé vlastnosti vzorku změnou hustoty nosičů náboje nebo vytvořením pinningových center.

Supravodivé vlastnosti vzorků a jejich fázové složení závisí na technologii přípravy. První část této práce se tedy soustředí na výběr optimálního způsobu přípravy. První způsob sestává ze dvou kalcinací (24 hodin při 800°C) směsi všech výchozích látek (Bi_2O_3, PbO, $SrCO_3$, $CaCO_3$ a CuO), vylisování tablet a reakce v pevné fázi (168 hodin při 840°C). Druhý způsob [1] vychází ze směsi CuO, $CaCO_3$ a $SrCO_3$, která se kalcinuje 48 hodin při 920°C. Teprve potom se k takto připravenému prekurzoru přidají zbývající oxidy a směs je zahřívána 144 hodin při 835°C. Vzhledem k tomu,

že přítomnost PbO napomáhá vzniku fáze 2223, bylo do směsi před lisováním tablet přidáno ještě nadstechiometrické množství oxidu olovnatého. Vylisované tablety pak byly slinovány na vzduchu při 845°C po dobu 96 hodin a pak rychle ochlazeny na měděné destičce. Fázové složení vzorků bylo určeno pomocí RTG fázové analýzy.

Druhá z výše popsaných metod vedla k vyššímu obsahu fáze 2223 (75%) a byla tedy zvolena pro přípravu vzorků, v nichž je kyslík částečně substituován fluorem. Jako výchozí látky posloužily opět příslušné oxidy, uhličitany a fluorid měďnatý. Vzorky byly charakterizovány měřením teplotní závislosti elektrického odporu a kritické proudové hustoty a jejich fázové složení určeno opět pomocí RTG fázové analýzy.

Tato práce vznikla v rámci projektu s podporou GA ČR pod číslem 203/05/0114 a Ministerstva školství pod číslem MSM 60461373/02.

[1] Ben Azzouz F., M`chirgui A., Nait Slimen N., Ben Salem M.: *Physica C 416, 115* (2004)

2PO28

CRYSTAL STRUCTURES, SPECTRAL AND MAGNETIC PROPERTIES of COBALT(II) PYRIDINECARBOXYLATES

Jana Jašková[a], Peter Segľa[a], Dušan Mikloš[a], Maria Jolant[a] Korabik[b], Jerzy Mrozinski[b], Reijo Sillanpää[c], Milan Melník[a]

[a]*Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak Technical University, 812 37 Bratislava, Slovak Republic, E-mail: jana.jaskova@stuba.sk*
[b]*Faculty of Chemistry, University of Wroclaw, F. Joliot-Curie 14, 50 383 Wroclaw, Poland*
[c]*Department of Chemistry, University of Jyväskylä, FIN-40351 Jyväskylä, Finland*

Preparation, spectral properties, magnetic properties and crystal structure of Cu^{II} and Co^{II} complexes $[MX_2(H_2O)_4]$ (X = nicotinate or isonicotinate), $[Cu(2\text{-MeSnic})_2(H_2O)]_2$ (2-MeSnic = 2-methylthionicotinate) and $[Cu\{2,6\text{-}(MeO)_2nic\}_2(H_2O)]_2$ (2,6-$(MeO)_2$nic = 2,6-dimethoxynicotinate) as well as of their adducts have been described in several previous papers [1-3].

As a continuation of our research in this field we report in the present paper preparation, crystal structure and magnetic properties of two new Co^{II} complexes, namely [Co(2-MeSnic)2(H2O)4].4H2O (***I***) and $\{[\{2,6\text{-}(MeO)_2nic\}_2(H_2O)2Co(\mu\text{-}H_2O)Co(H_2O)4]\{2,6\text{-}(MeO)_2nic\}_2.6H_2O\}n$ (***II***).

In a molecular complex (***I***), the Co(***II***) central atom is octahedrally coordinated by two oxygen atoms of two unidentate 2-MeSnic carboxyl groups and by four water molecules. The molecular structure of polymeric complex (II) consists from two nonequivalent Co(II) central atoms surprisingly bridged by a water molecule. One of them is octahedrally coordinated by oxygen atoms of the carboxyl groups of 2,6-$(MeO)_2$nic, and four water molecules. The second Co(II) atom is also octahedrally coordinated by six water molecules. The charge of the cationic part is compensated for by two independent anionic 2,6-$(MeO)_2$nic units.

Magnetic susceptibility measurements for both complexes were carried out. Increasing as well as decreasing of magnetic moment at the lowest temperature suggests intramolecular ferromagnetic interaction in the chain and intermolecular antiferromagnetic interactions between the chains, respectively.

Present work has been financially supported by the grant agency of the Slovak Republic (Grant No. 1/2452/05) and Technology Assistance Agency under the contract No. APVT-20-005504.

[1] K. Waizumi, M. Takuno, N. Fukushima, H. Masuda, J. *Coord. Chem. 44*, 269 (1998).
[2] D. Mikloš, P. Segľa, M. Palicová, M. Kopcová, M. Melník, M. Valko, T. Glowiak, M. Korabik, J. Mrozinski, *Polyhedron, 20*, 1867 (2001).
[3] J. Jašková, D. Mikloš, M. Korabik, V. Jorík, P. Segľa, M. Palicová, B. Kaliňáková, D.Hudecová, J. Švorec, A. Fischer, J. Mrozinski, T. Lis and M. Melník, *Advances in Coord., Bioinorg. And Inorg. Chemistry, ed. M. Melník, J. Šima and M. Tatarko, STU Press, 84* (2005).

2Po29

OPTIMALIZACE PODMÍNEK PŘÍPRAVY PIGMENTŮ

Milan Javůrek , Petra Šulcová[a)], Miroslav Trojan[a)]

Katedra řízení procesů a výpočetní techniky, Milan.Javurek@upce.cz
[a)]*Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko - technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubic, ČR*

Výsledná barevnost pigmentů připravovaných v pevné fázi při vysokých teplotách závisí jednak na způsobu přípravy (homogenizace směsi, výběr reakčních surovin, složení reakční směsi) a na podmínkách přípravy (teplota kalcinace). Závislost výsledné barevnosti na podmínkách přípravy však vykazuje zvláštní deformace. Barevnost hodnotíme v barevném systému CIE L*a*b* (1976) tj. určujeme hodnotu jasu L* a souřadnice a* (rozsah zelená - červená) a b* (rozsah modrá - žlutá). Měření barevnosti bylo prováděno přístrojem MiniScan (HunterLab, USA), před každou sérií měření byl kalibrován na bílý a černý standard.

Byl použit systém pigmentu $A_{2-x}B_xO_3$, kde x = 0,1; 0,2; 0,3; 0,4 a 0,5 připravovaný reakcí příslušných oxidů v pevné fázi při teplotách 650, 700, 750, 800 oC. Jako pojivo pro výsledný pigment byl použit akrylátový kopolymer. Po natření na papírovou podložku byly měřeny hodnoty barevných souřadnic L*, a*, b* vždy 10x pro každý vzorek.

Tím vznikla matice dat o 4 sloupcích (4 teploty) a 5x po deseti řádcích (5 různých přídavků chromoforu a 10 opakování

měření barevnosti každého vzorku). Matice byly celkem tři - pro každou vyhodnocovanou veličinu (L*, a*, b*).

Data byla vyhodnocována metodou ANOVA (analysis of variance, analýza rozptylu), jedná se o standardní metodu dostupnou a popsanou ve všech statistických učebnicích. Samotný algoritmus je rovněž běžně dostupný, zde byl použit program EXCEL 2003, jehož součástí ANOVA je. Při porovnání s dalšími programy (např. ADSTAT) bylo dosaženo shodných výsledků.

Jednou z možností modifikace je přídavek mineralizátoru do reakční směsi. Pro jednu koncentraci chromoforu B (x = 0,4) bylo testováno 10 různých mineralizátorů. Při porovnání dat byl výběr zúžen na 5 (CaF_2, MgF_2, H_3BO_3, AlF_3, KCl), ostatní byly vždy shodné s některým z uvedených. Již z tohoto testování vyplynulo, že přídavek mineralizátoru způsobuje snížení interakce faktorů, ovšem za cenu mírného snížení specifického vlivu obou faktorů. Toto bylo vyhodnocováno opět dvoufaktorovou ANOVOU, kde jeden z faktorů byla teplota a druhý faktor byl přídavek jednoho z mineralizátorů. Opět každá z měřených veličin (L*, a*, b*) byla vyhodnocována samostatně, tj. pracovalo se s třemi maticemi dat. Jako hlavní ukazatel byla brána hodnota Fisher - Snedecorova testu pro jednotlivé faktory.

Další zohledňovaný faktor bylo množství přídavku mineralizátoru - pracovalo se s 1, 3 a 5 % přídavku do reakční směsi. Tak byly získáno devět sérií měření pro tři přídavky mineralizátoru a tři vyhodnocované parametry. Jeden z faktorů byla teplota a druhý bylo pět vybraných mineralizátorů. V další sérii výpočtů byl ještě zařazen sloupec měření bez mineralizátoru.

Opět se potvrdilo, že přídavek mineralizátorů působí snížení interakce základních faktorů, tj. že jak koncentrace, tak přidaný mineralizátoru mají vliv na výsledný pigment. Pro nižší koncentraci mineralizátoru (1%) se však sníží vliv faktorů zejména na parametry L* a b*, parametr a* je ovlivněn stále významně především výběrem mineralizátoru. Vyšší koncentrace mineralizátoru (5%) způsobí jednak zvýšení vlivu faktorů na parametry L* a*, ale hlavně na parametr b*. Pokud bychom měli srovnat míru vlivu jednotlivých faktorů, téměř vždy je významnější vliv přidaného mineralizátoru než vliv teploty výpalu. Pouze pro vyšší obsah mineralizátoru a parametr b* se jeví vliv teploty jako významnější.

Z těchto závěrů vyplývá, že experiment by bylo možno modifikovat podle požadavků kladených na výsledný pigment - tj. jeho barevnost. Pokud preferujeme barevnou složku a*, zohledňujeme výběr mineralizátoru o vyšší koncentraci, pokud preferujeme barevnou složku b*, soustředíme se spíše na výběr teploty výpalu.

Tato práce je podporována projektem GAČR č. 104/05/2081.

2Po30

PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE SKEL SYSTÉMU $ZnO-Sb_2O_3-P_2O_5$

Josef Jirák, Ladislav Koudelka, Petr Mošner

Katedra obecné a anorganické chemie, Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická,
532 10 Pardubice, Česká republika, josef.jirak@upce.cz

Byly studovány vzorky skel systému $ZnO-Sb_2O_3-P_2O_5$ připravené reakcí ZnO, Sb_2O_3 a H_3PO_4 ve třech kompozičních řadách $(60-x)ZnO-xSb_2O_3-40P_2O_5$, $50ZnO-xSb_2O_3-(50-x)P_2O_5$ a $40ZnO-xSb_2O_3-(60-x)P_2O_5$.

Při záměně Sb_2O_3 za ZnO v řadě $(60-x)ZnO-xSb_2O_3-40P_2O_5$ vzrůstá měrná hmotnost skel i hodnoty molárního objemu, zatímco při záměně Sb_2O_3 za P_2O_5 molární objem klesá. Při záměně Sb_2O_3 za ZnO klesají hodnoty transformační teploty skel, T_g, zatímco v řadě se 40 mol.% ZnO hodnoty T_g vzrůstají a v řadě s 50 mol.% ZnO se příliš nemění.

Při zahřívání všechna skla krystalizují v rozmezí teplot 364-570°C. Pomocí rentgenové difrakční analýzy byly identifikovány vznikající krystalické fáze, kterými jsou nejčastěji $Zn(PO_3)_2$, $Zn_2P_2O_7$, $Zn_3(PO_4)_2$ a $SbPO_4$ v závislosti na složení skel. U kompoziční řady $(60-x)ZnO-xSb_2O_3-40P_2O_5$ byla studována rychlost rozpuštění skel, která se pohybovala v rozmezí $1{,}1x10^{-4}$-$1{,}8x10^{-5}$ g/cm^2.min.

Ramanova spektra potvrdila vestavování Sb_2O_3 do strukturní sítě ve formě celků SbO_3, což se ve spektrech projevuje přítomností vibračních pásů v oblasti 560-640 cm^{-1} při menším obsahu Sb_2O_3 a pásu s maximem při 454-457 cm^{-1} při větším obsahu Sb_2O_3. Celky SbO_3 nejprve vstupují mezi fosfátové řetězce, které zkracují, což se projevuje posunem vibračního pásu PO_4 celků k nižším vlnočtům. Při vyšších obsazích Sb_2O_3 celky SbO_3 vytvářejí polymerní řetězce jako v amorfním Sb_2O_3.

2Po31

PREPARATION OF $Mg(OH)_2$ AND $CaCO_3$ FROM DOLOMITE

Jurišová J., Fellner P., Khandl V.

Department of Inorganic Technology, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, SK-812 37 Bratislava,
e-mail: jana.jurisova@stuba.sk

Dolomite of high purity (~99 mass %) was calcined at the temperature of 1000 °C for 4 h. The resulting mixture of calcium and magnesium oxides was treated with aqueous solution of ammonium nitrate and ammonium hydroxide at different temperatures: 0 °C, 25 °C and 100 °C. The experiment at 100 °C was carried out in a pressure reactor (p ~ 200 kPa). Solid phase consisted of $Mg(OH)_2$ while calcium cations were extracted into the solution. Size and shape of

$Mg(OH)_2$ crystals depends on the temperature used. Calcium cations were precipitated from the solution by the addition of $(NH_4)_2CO_3$. After replenishment of NH_4NO_3 and ammonia the solution can be returned back to the process. Material balance of this process is presented. Thus the treatment of dolomite in this way can be considered as a low waste technology.

2Po32

PŘÍPRAVA, STUDIUM A CYTOTOXICKÁ AKTIVITA DVOJJADERNÝCH Cu(II) KOMPLEXŮ S DERIVÁTY ADENINU

Alena Klanicová[a], Zdeněk Trávníček[a,b,*], Igor Popa[b], Vladimír Kryštof[b]

[a]Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, Křížkovského 10, CZ-771 47, Olomouc, Česká republika
e-mail: klanicova@prfholnt.upol.cz, trav@aix.upol.cz
[b]Laboratoř růstových regulátorů, Univerzita Palackého & Ústav experimentální botaniky AV ČR, Šlechtitelů 11, CZ-783 71, Olomouc, Česká republika

N6-substituované deriváty adeninu patřící do skupiny rostlinných hormonů, cytokininů, mají stimulační účinky na dělení rostlinných buněk [1]. Bylo však také prokázáno, že mohou zastavit dělení některých typů buněk živočišných, a také inhibovat CDK - cyklin dependentní kinasy (enzymy účastnící se buněčného cyklu). Tato skutečnost je zajímavá v souvislosti s protinádorovou aktivitou těchto látek. Prokázali jsme, že protinádorové účinky těchto organických látek mohou být zvýšeny jejich koordinací na atom vhodného přechodného kovu, např. Pt, Pd, Ni, Co [2,3].

Prezentovaná práce je věnována syntéze a charakteristice Cu(II) komplexů s některými deriváty *N6*-benzyladeninu, jejichž benzylový kruh je substituován halogenem nebo methoxyskupinou. Tyto látky byly charakterizovány pomocí chemické analýzy prvků, IR, UV-VIS, NMR, EPR a MS spektroskopie, vodivostních a magnetochemických měření a termické analýzy. Rentgenostrukturní analýza potvrdila vznik dvojjaderných Cu(II) komplexů o složení $[Cu_2(\mu\text{-}HL)_4(ClO_4)_2](ClO_4)_2$, kde HL je elektroneutrální forma příslušného ligandu. *In vitro* cytotoxická aktivita připravených komplexů a výchozích látek byla testována Calcein AM testem na vybraných lidských buněčných nádorových liniích: G-361 (maligní melanom), K-562 (erythroleukemie), MCF7 (prsní adenokarcinom) a HOS (osteosarkom). Studována byla rovněž inhibiční aktivita vybraných CDK. V rámci prezentace bude diskutován vztah mezi strukturou komplexů a jejich biologickou aktivitou.

Děkujeme GA ČR (203/04/1168) a MŠMT (MSM 6198959218) za finanční podporu.

[1] J. Veselý, M. Havlíček, M. Strnad, J.J. Blow, A. Donella-Deana, L. Pinna, D.S. Leatham, J.Y. Kato, L. Detivaud, S. Leclerc, L. Meijer, Eur. *J. Biochem., 224*, 771-786 (1994).
[2] Z. Trávníček, M. Maloň, M. Zatloukal, K. Doležal, M. Strnad, J. Marek, *J. Inorg. Biochem., 94*, 307-316 (2003).
[3] Z. Trávníček, A. Klanicová, I. Popa, J. Rolčík, *J. Inorg. Biochem., 99*, 776-786 (2005).

2Po33

NEW ANION RECEPTORS BASED ON CALIX[4]ARENES

Jana Klimentová [1], Pavel Vojtíšek [2]

Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, Charles University, Prague, Czech Republic, [1] klimentova.j@seznam.cz, 2 pavojt@natur.cuni.cz

Anion receptors are molecules which have recently attracted a lot of interest because of their potential use in many areas of research and everyday life [1]. They can be used as sensors in ion selective electrodes, selective extractants and phase transfer catalysts, medicine, nuclear waste reprocessing, biochemical research and environmental area [1].

According to the results published in literature [2], we have tried to design a new type of potential anion receptors. The receptors, *cone* - 5,11,7,23 - tetrakis(2-pyridylmethylamino) - 25,26,27,28 - tetrapropyloxycalix[4]arene **2a**; *cone* - 5,11,17,23 - tetrakis(3-pyridylmethylamino) - 25,26,27,28 - tetrapropyloxycalix[4]arene **2b**; *cone* - 5,11,17,23 - tetrakis(4-pyridylmethylamino) - 25,26,27,28 - tetrapropyloxycalix[4]arene **2c**; *cone* - 5,11,17,23 - tetrakis(1-ferrocenylmethylamino) - 25,26,27,28 - tetrapropyloxycalix[4]arene **2d** and their Schiff base precursors, *cone* - 5,11,7,23 - tetrakis(2-pyridylmethimino) - 25,26,27,28 - tetrapropyloxycalix[4]arene **1a**; *cone* - 5,11,17,23 - tetrakis(3-pyridylmethimino) - 25,26,27,28 - tetrapropyloxycalix[4]arene **1b**; *cone* - 5,11,17,23 - tetrakis(4-pyridylmethimino) - 25,26,27,28 - tetrapropyloxycalix[4]arene **1c**; *cone* - 5,11,17,23 - tetrakis(1-ferrocenylmethimino) - 25,26,27,28 - tetrapropyloxycalix[4]arene **1d**; *cone* - 5,11,17,23 - tetrakis(2-thiophenylmethimino) - 25,26,27,28 - tetrapropyloxycalix[4]arene **1e** and *cone* - 5,11,17,23 - tetrakis(2-pyrrolylmethimino) - 25,26,27,28 - tetrapropyloxycalix[4]arene **1f** were prepared and characterized. Compounds **2a** - **2d** form complexes with anions (fluoride, dihydrogen phosphate). The X-ray crystal structures of compounds **1b**, **1e** and **1f** are also reported.

[1] P. D. Beer, P. A. Gale, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 486 (2001)
[2] a. Evans A. J., Matthews S. E., Cowley A. R., Beer P. D., *Dalton Trans., 24*, 4644 (2003)
b. Dudič M., Lhoták P., Stibor I., Lang K., Prošková P., *Org. Lett., 5*, 149 (2003)
c. Casnati A., Bonetti F., Sansone F., Ugozzoli F., Ungaro R., *Coll. Czech. Chem. Commun., 69*, 1063 (2004)

2Po34

PREPARACE HUMINOVÝCH KYSELIN Z JIHOMORAVSKÝCH LIGNITŮ

Ivan Koutník, Petr Ševčík

Vysoká škola báňská - Technická univerzita Ostrava, Fakulta metalurgie a materiálového inženýrství, katedra chemie, Tř.17. listopadu 15, 708 33 Ostrava - Poruba, ivan.koutnik@vsb.cz

Jednou z problematik preparace huminových kyselin z nízko prouhelněných kaustobiolitů je volba kompromisu mezi složitostí separačních technik, spotřebou chemikálií, destilované vody a tudíž cenou a mezi zbytkovým obsahem nečistot - zejména minerálních příměsí z použitých činidel. Anorganické složky v konečném produktu mohou mít původ v prvním kroku preparace jímž je alkalická extrakce [1]. Kvantitativnost extrakce je přitom ovlivňována celou řadou parametrů, především pH, iontovou silou a polárností rozpouštědla [2]. Dalším zdrojem anorganických příměsí je následná precipitace huminových kyselin okyselením zpravidla minerální kyselinou.

V předkládané práci jsou studovány možnosti použití některých organických bází pro extrakci huminových kyselin z jihomoravských lignitů. Pozornost je věnována závislosti účinnosti extrakce na pH a zejména na polárnosti rozpouštědel. Volba acidifikačního činidla byla provedena v souladu s celkovým cílem vnést do získávané látky co nejméně anorganických příměsí, čemuž byla přizpůsobena celková metodika.

U získaných produktů byla kromě ověřována čistota a v rámci možností i vliv použitých činidel na strukturu získaných huminových kyselin.

[1] D. Garcia, J. Cegarra, M. Abad, b, F. Fornes, *Bioresource Technology 43*, 221-225, (1993)
[2] M. Klučáková, M. Pekař, Colloids and Surfaces A: *Physicochem. Eng. Aspects 252*, 157-164, (2005)

2Po35

STUDIUM AMORFNÍCH TENKÝCH VRSTEV $Ag_x(As_{0.40}S_{0.60})_{100-x}$ PŘIPRAVENÝCH PULSNÍ LASEROVOU DEPOZICÍ (PLD) A MĚŘENÍ KINETIKY DIFÚZE STŘÍBRA V PLD VRSTVĚ $As_{40}S_{60}$.

M. Krbal[a] , T. Wágner[a], J. Jedelský[a], Mil. Vlček [b], B. Frumarová[b], M. Frumar[a]

[a]Univerzita Pardubice, Nám. Čs. Legií 565, 53210 Pardubice, Česká Republika.
[b]Společná laboratoř chemie pevných látek Ústavu macromolekulární chemie AVČR a Univerzity Pardubice, Studentská 94, 53210 Pardubice, Česká Republika, milos.krbal@upce.cz

Tenké vrstvy o složení $As_{40}S_{60}$ byly připraveny pulsní laserovou depozicí (PLD) [1]. Výchozím materiálem pro tenké vrstvy byl objemový vzorek $As_{33}S_{67}$. Pro přípravu tenkých vrstev byl použit KrF laser o vlnové délce λ = 248nm, konstantní energií na výstupu E = 290 mJ/puls, s dobou trvání pulsu t = 30ns a opakovací rychlostí 20Hz. Stříbro bylo deponováno na povrch chalkogenidových vrstev metodou vakuového napařování. Optickou a tepelně indukovanou difuzí stříbra do chalkogenidu byly připraveny vrstvy $Ag_x(As_{0.40}S_{0.60})_{100-x}$ o složení v rozsahu x = 0 - 23 at. %. Složení vrste bylo analyzováno metodou EDX. Kinetika opticky a tepelně indukovaného rozpouštění a difuze stříbra v amorfní tenké vrstvě o složení $As_{40}S_{60}$ byla měřena optickým sledováním změny tloušťky stříbrem nedotovaného chalkogenidu během světelné expozice. Dále byly změřeny a vypočteny optické vlastnosti připravených vrstev $Ag_x(As_{0.40}S_{0.60})_{100-x}$. Rozdíl v indexu lomu mezi nedotovaným a stříbrem dotovaným (23 at.% Ag) chalkogenidem byl (Δn) ~ 0.2. S rostucím obsahem stříbra byl pozorován i pokles optického gapu $E_{g,opt}$ z 2.24 na 2.01 eV. Ramanovou spektroskopií byla určena struktura připravených tenkých vrstev.

[1] T. Wágner, M. Krbal, P. Němec, Mir. Vlček, M. Frumar, Th. Wagner, Mil. Vlček, V. Peřina, A. Macková, V. Hnatovitz, S.O. Kasap:. *Appl. Phys. A. 79*, 1563,(2004).

2Po36

KOMPLEXY NIKLU A MĚDI S BENZENTRIKARBOXYLOVOU KYSELINOU, VYBRANÝMI N-DONOROVÝMI LIGANDY A SCHIFFOVÝMI BÁZEMI

A. Kurečka, J. Kameníček, P. Kopel, Z. Šindelář

Katedra anorganické chemie PřF UP, Křížkovského 10, 771 47 Olomouc, ČR
E-mail: akurecka@centrum.cz

Komplexy přechodných kovů s N-donorovými ligandy a potenciálně můstkovými karboxylovými kyselinami jsou studovány nejen pro zajímavé magnetické či spektrální vlastnosti z hlediska použití jako katalyzátory či prekursory pro přípravu nanomateriálů, ale rovněž jako látky s možnou aplikací ve farmacii pro své případné antibakteriální, antivirové či protinádorové účinky. [1-3].

Byly připraveny původní komplexy niklu a mědi s benzentrikarboxylovou kyselinou v kombinaci s N-donorovými ligandy a Schiffovými bázemi:

$Ni_3(bimz)_6(btc)_2.12H_2O$ (1)
$Ni_3(1,2,3\text{-}btz)_9(btc)_2.12H_2O$ (2)
$Ni_2(C_{13}H_{10}NO)(btc).H_2O$ (3)
$Ni_3(C_{17}H_{16}N_2O_2)_2(Hbtc).9H_2O$ (4)
$Ni_2(C_{13}H_9N_2O_3)(btc).4H_2O$ (5)
$Cu_3(pmdien)_3(btc)(ClO_4)3.6H_2O$ (6)
$Cu_2(C_{14}H_{12}NO_2)(btc).7H_2O$ (7)
$[Cu_3(mdpta)_3(btc)](ClO_4)_3.3H_2O$ (8)

(H_3btc = kyselina benzen-1,3,5-trikarboxylová, bimz = benzimidazol, 1,2,3-btz = 1,2,3-benztriazol, $C_{13}H_{11}NO$ = 2-[(fenylimino)methyl]fenol, $C_{17}H_{18}N_2O_2$ = N,N'-

bis(salicyliden)propylendiamin, $C_{13}H_{10}N_2O_3$ = 2-{[(2-nitrofenyl)methylen]amino}fenol, pmdien = N,N,N',N'',N''-pentamethyl- diethylentriamin, $C_{14}H_{13}NO_2$ = 2-[(4-methoxy-fenylimino)methyl]fenol, mdpta = N,N-bis-(3-aminopropyl)methylamin).

Připravené komplexy byly podrobeny elementární analýze a dále studovány UV-VIS a IR spektroskopií, pomocí magnetochemických a vodivostních měření a u vybraných látek i termickou analýzou. U komplexu **8** se podařilo získat vhodný monokrystal a byla provedena kompletní rentgenostrukturní analýza.

Z hodnot efektivních magnetických momentů a z výsledků měření UV-VIS spekter lze usuzovat, že komplexy niklu jsou zřejmě polymerní a jejich koordinační sféra může mít uspořádání oktaedru nebo trigonální bipyramidy. U komplexů mědi nelze na základě výsledků měření spolehlivě rozhodnout, zda mají centrální atomy koordinační číslo pět nebo šest. Komplex 6 bude pravděpodobně trimerní a komplex **7** nejspíše polymerní. Komplex **8** je trojjaderný, ve kterém je každý Cu(II) ion koordinován jedním kyslíkovým atomem karboxylové skupiny kyseliny benzen-1,3,5-trikarboxylové a třemi dusíkovými atomy N,N-bis-(3-aminopropyl)methylaminu v deformovaném tetraedrickém uspořádání.

Na posteru budou podrobně diskutovány výsledky fyzikálně-chemického studia včetně rentgenostrukturní analýzy.

Tato práce vznikla s podporou grantu MSM 6198959218 a FRVŠ 20313101/11.

[1] Keeffe M. O., Eddaoudi M., Li H., Reineke T. and Yaghi O. M.: *J. Solid State Chem. 3*, 2000 (2000).
[2] Feng S. and Xu R.: *Acc. Chem. Res. 34*, 239 (2001).
[3] Ferey G.: *Chem. Mater. 13*, 3084 (2001).

2Po37

NEW EXTRACTING AGENTS BASED ON [(1,2-$C_2B_9H_{11}$)2-3,3'-Co]- ION

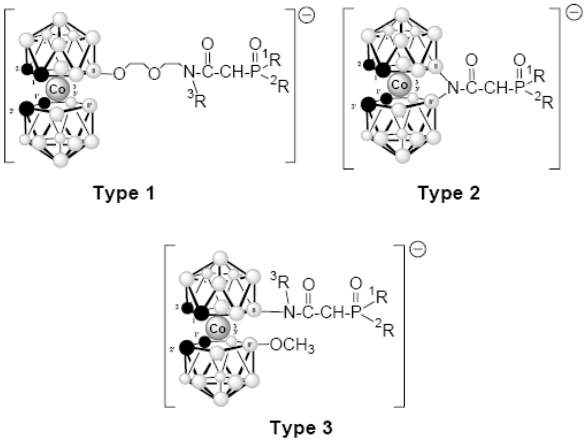
Magdalena Kvíčalová[a], Pavel Selucký[b], Ivana Císařová[c], Bohumír Grüner[a]

[a]*Institute of Inorganic Chemistry, Czech Academy of Sciences, 250 68 Řež, Czech Republic*
[b]*Nuclear Research Institute plc, 250 68 Řež, Czech Republic, cDpt. of Chemisty, Faculty of Natural Sciences of Charles University, Hlavova 2030, 128 42, Prague 2, Czech Republic, magda@iic.cas.cz*

The singly charged anion cobalt bis(dicarbollide) [(1,2-$C_2B_9H_{11}$)2-3,3'-Co]- ion (**1**) belongs to the class of 12-vertex icosahedral borane clusters with 26 cage electrons that are characterized by their extraordinary chemical and thermal stability and their similarity in properties to inorganic superacids.[1] The ion **1** has been found many ears ago to serve as a powerful extraction agent for Cs^+ and Sr^{2+}.[2] However, without modification with metal chelating organic moiety or its presence in a synergic mixture, this ion alone is unable to extract polyvalent nuclides, such as lanthanides and actinides (Ln/Ac), which are main source of the long term radiotoxicity of the radioactive waste after reprocessing. There has been continuous interest in the development of selective extraction agent based on the anion **1**, particularly these which would allow also for separation of actinides and lanthanides from strongly acidic high level activity nuclear waste. Recently, newly developed series of the anion **1** derivatives functionalized with *exo*-skeletal substituents, have been studied for purposes of Ln/Ac extraction[2]. Out from many families of such compounds tested to date, the most promising have proven the ligating anions, which contain in their structures Ln/Ac binding amide carbamoyl methyl alkylphenyl or diphenyl phosphine oxide groups (CMPO) covalently bound via the amidic nitrogen to the anion **1**.[3]

Three different structural types of these compounds with different properties have been prepared (see Chart 1). The main sythetic strategy to these compounds has been based on the high yield reactions of the aminoderivatives of ion **1** with nitrophenylester of the alkylphenyl or diphenyl phosphine phosphoryl acetic acid.. The structures of metal complexes of all three types will be presented, along with illustrative data from the extraction tests. The influence of the amide and phosphine end group substitution, lenght of the connector and the rigidity of the molecule on extraction properties will be discussed.

Chart 1



The authors gratefully acknowledge Dr. Josef Čáslavský from the Institute of Analytical Chemistry, AS CR for M. S. measurements and Prof. Jaromír Plešek from the Institute of Inorganic Chemistry, AS CR for help and discussions. Partial support from the E. U. I.P. Europart (6th F.P., F16W-CT-2003-508854) and the Ministry of Education of the Czech Republic (Project LC523) is appreciated.

2Po38

STRUKTURÁRNÍ CHARAKTERISTIKA POROZITY MATERIÁLU NA BÁZI UHLÍKU

Lhotka M., Sedlářová I.

Ústav anorganické technologie, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6
e-mail:Miloslav.Lhotka@vscht.cz

V chemii a chemické technologii znalost porézní struktury je potřebná zejména u porezních membrán, katalyzátorů a sorbentů. Na ÚAT VŠCHT v Praze se texturní vlastnosti materiálů určují pomocí multifukční přístroje ASAP 2020 , rtuťové porozimetrie a heliového pyknometru.

Princip měření rtuťovým porozimetrem (AutoPore IV 9500) spočívá ve sledování závislosti vloženého tlaku na úbytku rtuti v nádobce, z níchž je vtlačována do pórů měřeného materiálu. Stanovení je rozděleno na nízkotlakou a vysokotlakou část analýzy, kde postupně probíhá měření v oblasti mezopórů v tlakovém rozsahu 0,03 MPa do 400 MPa, tj. pro poloměry pórů od 2.10^{-5} do $1,5,10^{-9}$ m.

ASAP 2020 využívá pro své měření převážně adsorpční izotermu N2, z které se pak získává měrný povrch mezopórů pomocí např. metody BET, distribuce objemu a plochy mezopórů se určuje pomocí BJH metody, distribuce objemu a plochy mikroporů lze určit např. pomocí izotermy Dubinina.

Uvedených metod se používá na měření texturních vlastností membrán na bázi uhlíku. Zpětnou vazbou lze získat výsledky např. ve tvaru teplota přípravy membrán - objem pórů.

Tento výzkum je podporován Grantovou agenturou ČR, projekt č. 106/05/0492.

2Po39

FYZIKÁLNĚ-CHEMICKÉ VLASTNOSTI SLOUČENIN TYPU Sr_2CeO_4

Jana Luxová, Petra Šulcová, Miroslav Trojan

Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10, Pardubice, Česká republika, jana.luxova@upce.cz

Jako luminiscenční pigmenty lze označit ty sloučeniny, které mají schopnost emitovat záření po excitaci, jež byla způsobena dodáním nějaké energie [1]. Jedním z materiálů vykazující fotoluminiscenční vlastnosti je Sr_2CeO_4. Tato látka byla objevena jako modro-bílý luminiscent s měrnou hmotností 5,52 $g.cm^{-3}$, který po excitaci UV zářením, proudem elektronů či rentgenovým záření, vykazuje světélkující vlastnosti [2,3].

Tato práce je zaměřena na stanovení fyzikálně-chemických vlastností sloučenin typu Sr_2CeO_4. Sloučeniny byly připraveny jak klasickým suchým způsobem přípravy, dále pak SMS procesem a pomocí mechanické aktivace. Sloučeniny připravované klasickou cestou a mechanickou aktivací byly kalcinovány při 1200 - 1300 °C po dobu 2 hodin. Podstata SMS procesu spočívá v suspenzním míchání surovin, kdy v prvním stupni byl připraven poloprodukt při 200 °C, který byl následně kalcinován při 1100 - 1300 °C po dobu 2 hodin.

Kalcináty byly po rozmělnění promyty větším množstvím horké destilované vody z důvodu odstranění nežádoucích vodorozpustných příměsí.

U všech testovaných sloučenin byly stanoveny některé fyzikálně-chemické vlastnosti, např. sypná a setřesná hmotnost, měrná hmotnost a zejména hodnoty pH a rezistivity vodných výluhů sloučenin. Tyto hodnoty byly stanoveny jako 10 % suspenze v redestilované vodě.

Sloučeniny byly podrobeny testu odolnosti vůči působení 0,1 $mol.dm^{-3}$ HCl.

Tato práce byly podporována projektem MSM 0021627501.

[1] Trojan M., Šolc Z., Novotný M.: Pigments (Inorganic) Kirk-Othmer Enc. of Chem. Technol., Vol. 19, J. Wiley and Sons Inc., (New York) (1996)
[2] Hirai T. and Kawamura Y.: J. Phys. Chem. B, 12763 - 12769, (2004)
[3] Nag A. and Narayanan Kutty T.R.: J. Mater. Chem., 13, 370 - 376, (2003)

2Po40

DUSIČNAN DIFENYLGUANIDINIA(1+) - STUDIUM VIBRAČNÍCH SPEKTER, KRYSTALOVÉ STRUKTURY A NELINEÁRNÍCH OPTICKÝCH VLASTNOSTÍ

Zorka Macháčková[1], Ivan Němec[1], Karel Teubner[1], Petr Němec[2], Přemysl Vaněk[3]

[1]Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy, katedra anorganické chemie, Hlavova 2030, 12840, Praha 2, Česká Republika, e-mail: zorka.m@post.cz
[2]Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy, katedra chemické fyziky a optiky, Ke Karlovu 3, 121 16, Praha 2, Česká Republika
[3]Fyzikální ústav ČAV, Na Slovance 2, 182 21, Praha 8, Česká Republika

Diskutovaná sloučenina - dusičnan difenylguanidinia(1+) (**$DiphNO_3$**) - byla připravena v rámci systematického studia nových materiálů ve skupině solí anorganických oxokyselin s organickými dusíkatými kationty založenými na bázi derivátu guanidinu, u kterých lze očekávat nelineární optické vlastnosti (například SHG = generování druhé harmonické frekvence).

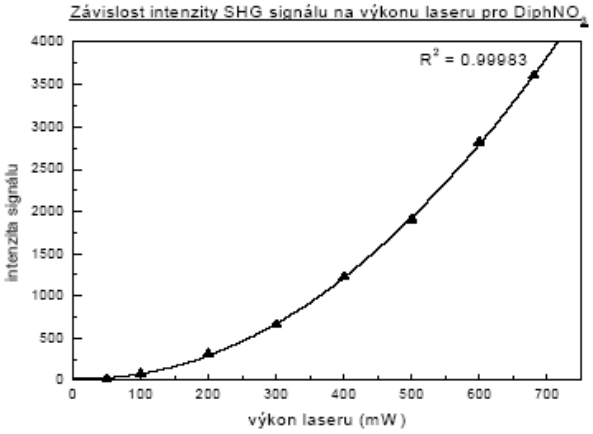
Byla připravena a charakterizována nová krystalická sloučenina **$DiphNO_3$**, která je na vzduchu stálá do teploty 403 K, kdy začínají krystalky tát. Při studiu teplotního chování metodou DSC byl nalezen při teplotě 160 K endo efekt.

Podstatu diskutovaného jevu jsme se snažili objasnit pomocí rentgenové strukturní analýzy. Získaná RTG data

při různých teplotách však nepotvrdila existenci fázového přechodu.

V návaznosti na interpretaci FTIR a Ramanových spekter získaných za laboratorní teploty byla studována FTIR spektra v teplotním rozmezí 90-300 K ve střední a vzdálené infračervené oblasti.

Na závěr celého projektu byla kvantitativně studována účinnost generování druhé harmonické frekvence připraveného polykrystalického vzorku pomocí pulsního titan-safírového laseru s vlnovou délkou λ=800 nm.



Tato práce byla realizována za podpory grantového projektu GAUK 337/2005/B-CH/PřF.

2Po41

VLIV VELIKOSTI ČÁSTIC CuO NA VLASTNOSTI SUPRAVODIVÉ FÁZE Bi-2223

Eva Májová, Vít Jakeš, Olga Smrčková, Dagmar Sýkorová

Ústav anorganické chemie,
Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5,
66 01, Praha 6, Eva.Majova@vscht.cz

Vlastnosti supravodivých materiálů jsou závislé jak na složení tak na struktuře. Vzhledem k tomu, že závislost vlastností supravodiče Bi - Sr - Ca - Cu - O na složení byla již mnohokrát studována, byla pozornost věnována struktuře a jejímu vlivu na vlastnosti materiálu. Cílem práce bylo zjistit, jak se změní magnetické a elektrické vlastnosti (kritická teplota, kritická proudová hustota), bude-li na přípravu standardů stechiometrického složení $Bi_{1,6}Pb_{0,4}Sr_2Ca_{2,5}Cu_{3,5}O_x$ (tzv. fáze Bi-2223, T_c = 110 K) použit práškový CuO s rozdílnou velikostí částic. Předpokladem pro práci bylo zvýšení kompaktnosti materiálu, což by mělo ovlivnit transportní vlastnosti supravodiče.

Změny velikosti částic se docílilo různými způsoby mletí ve vibračním kulovém mlýnku a v mlýnku s rotačním nožem. Na základě analýzy distribuce velikosti částic a fotografií z elektronového mikroskopu byly pro přípravu vzorků zvoleny podíly CuO mleté v mlýnku s rotačním nožem po dobu 20 a 60 minut, u nichž bylo dosaženo velikosti částic 10 mm. Ze zvolených prekurzorů byly připraveny vzorky supravodiče standardní reakcí v pevné fázi (technologický postup: mletí 10 minut, 1. kalcinace 24 hodin při teplotě 800°C, mletí 10 minut, 2. kalcinace při teplotě 800°C po dobu 24 hodin, mletí 10 minut, lisování tablet 5 minut při tlaku 800 MPa a slinování tablet při teplotě 840°C po dobu 168 hodin). U takto připravených vzorků byla změřena teplotní závislost kritické proudové hustoty a elektrického odporu a pórovitost.

Tato práce vznikla v rámci projektu s podporou GA ČR pod číslem 203/05/0114 a Ministerstva školství pod číslem MSM 60461373/02.

2Po42

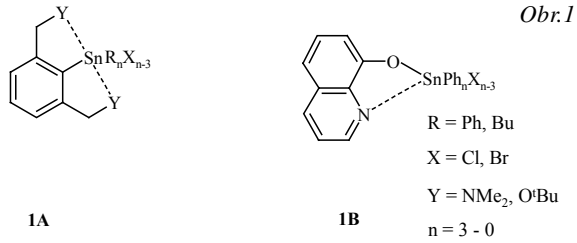
REAKCE TRIORGANOCINIČITÝCH Y,C,Y-CHELÁTŮ

Jana Martincová,* Roman Jambor

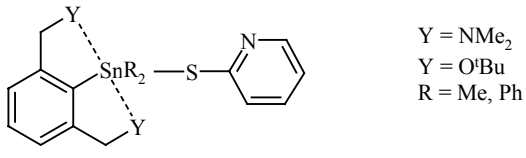
Katedra obecné a anorganické chemie, Univerzita Pardubice, nám.Čs.Legií 565,
Pardubice CZ - 532 10, Czech Republic
** email: jana.mart@email.cz*

Na našem pracovišti jsme se zabývali vlastnosti organociničitých sloučenin obsahující Y,C,Y- chelatující ligandy. U těchto sloučenin byla vždy nalezena silná, či slabá intramolekulární interakce Sn-Y (Obr 1A). Na druhou stranu byly připraveny organociničité sloučeniny s polárními skupinami obsahující donorový heteroatom Y'(Obr.1B). V těchto sloučeninách byla nalezena intramolekulární interakce Sn- Y'.

Obr.1



Z výše uvedených důvodů jsme se rozhodli připravit organociničité sloučeniny obsahující jak Y,C,Y- chelátující ligand, tak polární skupinu obsahující donorový atom (Obr.2). U takto připravených sloučenin lze předpokládat intramolekulární koordinaci Sn-Y, která způsobí nevazebný charakter heteroatomu přítomného na polární skupině a proto mohou být tyto heteroatomy by mohli být použity k donor-akceptorové vazbě s dalšími přechodnými kovy. Syntéza, vlastnosti, struktura těchto sloučenin a jejich reaktivita ke komplexům přechodných kovů bude diskutována.



Obr.2

Autoři si dovolují poděkovat za finanční podporu Ministerstvu školství (VZ 0021627501).

2Po43

STUDY OF THE PROPERTIES OF LEAD IODIDE FOR X-RAY DETECTION

M. Matuchová, K. Zdánský, J. Zavadil

Intitute of Radio Engineering and Electronic, Academy of Sciences of the Czech Republic, Chaberská 57, 182 51 Prague 8, Czech Republic, e-mail: Marie.Matuchova@tiscali.cz

Lead iodide PbI_2, is a promising material for X-ray and γ detectors operating at room temperature. It can be used in devices in a laboratory or outside for example for ecological measurements or for improved diagnostics methods. PbI_2 has some favourable properties, as low vapour pressure and high chemical stability. No degradation has been observed in a laboratory in six months. Crystals possess hexagonal layer structure and can be grown from solutions, melts, vapour and gels. More polytypes have been reported and the most common one is 2H.

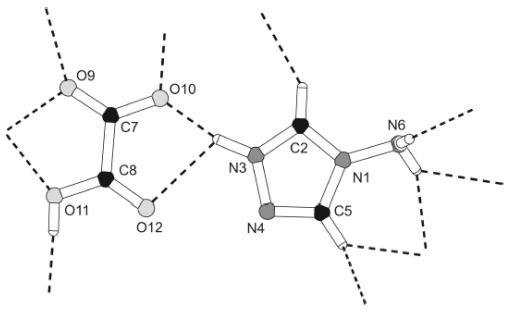
We report the development and optimisation of the method of direct synthesis for the preparation of PbI_2 crystals. We further report introduction of rear earth elements as admixtures during synthesis in order to study their influence on the quality of prepared material. The following rare earth elements have been used: Ce, Ho, Gd, Yb, Er and Tb in concentrations 0.05 - 0.5 at. %. Some crystals have been purified by zone melting and the effect of purification has been evaluated. Prepared crystals have been characterised by measurements of electrical resistivity and low temperature photo-luminescence. The resistivity of synthesized crystals varied from 10^9 to 10^{11} Ωcm and has been increased up to 10^{13} Ωcm.

2Po44

STUDIUM HYDROGENOXALÁTU 4-AMINO-1,2,4-TRIAZOLINIA(1+)

Irena Matulková[a], Ivan Němec[a], Karel Teubner[a], Petr Němec[b], Zdeněk Mička[a]

[a] Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Albertov 2030, 128 42 Praha 2, Česká republika, irena.mat@atlas.cz
[b] Katedra chemické fyziky a optiky, Matematicko-fyzikální fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Ke Karlovu 3, 121 16 Praha 2, Česká republika



Hydrogenoxalát 4-amino-1,2,4-triazolinia(1+) - **atox** byl připraven v rámci projektu zaměřeného na studium nových nelineárních optických materiálů krystalizací z vodného roztoku v molárním poměru 1 : 1 (kyselina šťavelová : 4-amino-1,2,4-triazol).

Atox krystalizuje v monoklinní krystalové soustavě s prostorovou grupou P 2_1 a mřížovými parametry: a = 3,7280(2) Å , b = 18,3490(14) Å, c = 4,9680(4) Å, β = 101,134(5) °, (R = 0,0284 pro 4240 reflexí).

Iontová struktura **atox** je tvořena alternujícími vrstvami kationtů a aniontů, kolmými na osu *b*. Anionty pomocí vodíkových vazeb vytvářejí řetězce ve směru 101, které jsou mezi sebou spojeny vodíkovými vazbami prostřednictvím kationtů. Kationty nejsou mezi sebou vázány pomocí vodíkových vazeb. Každý aniont se podílí svými karbonylovými kyslíkovými atomy na tvorbě dvou pětičlenných kruhů prostřednictvím dvou třístředových vodíkových vazeb.

Sloučenina byla dále charakterizována vibračními spektroskopiemi (IR a Ra). Pro jednoznačné přiřazení vibračních pásů byl připraven a spektroskopicky studován i N, O - deuterovaný analog. Interpretace vibračních spekter byla provedena na základě dřívějších studií podobných látek popsaných v literatuře[1,2].

Vzhledem k necentrosymetrickému krystalovému uspořádání byla provedena kvantitativní měření generování druhé harmonické frekvence.

Tato studie byla vypracována za podpory grantu GAUK 337/2005/B-CH/PřF.

[1] V. P. Sinditskii, V. I. Sokol, A. E. Fogelzang, M. D. Dutov, V. V. Serushkin, M. A. Porai-Koshits, B. S. Svetlov, *Zhurnal Neorganicheskoi Khimii,* 32, 1459-1562, (1987).
[2] F. Billes, H. Endrédi, G. Keresztury, *J. Mol. Struct.* (TEOCHEM), 530, 183-200, (2000).

2Po45

INTERKALÁTY FOSFOREČNANU VANADYLU S ESTERY

Klára Melánová, Ludvík Beneš, Vítězslav Zima, Jan Svoboda

Společná laboratoř chemie pevných látek Ústavu makromolekulární chemie AV ČR a Univerzity Pardubice, Studentská 84, 532 10 Pardubice; klara.melanova@upce.cz

Fosforečnan vanadylu a další isostrukturní vrstevnaté sloučeniny jsou schopny koordinovat Lewisovy báze a vytvářet interkalační sloučeniny. Nedávno byly popsány interkaláty s ketony, aldehydy a ethery, kde jsou hoštěné molekuly poutány donor-akceptorovou vazbou kyslíku buď ketonické nebo etherické skupiny k atomu vanadu. Analogické interkaláty lze připravit s estery. Cílem této práce bylo určit, který z kyslíkových atomů esteru je upřednostňován při koordinaci k vanadu. Byly studovány různé typy esterů - alifatické estery a diestery, karbonáty a laktony.

Interkaláty byly připraveny náhradou molekul 2-propanolu v $VOPO_4.1,5C_3H_7OH$. Připravené interkaláty jsou žluté krystalické látky obsahující jednu molekulu hosta na vzorcovou jednotku. V difraktogramech interkalátů jsou přítomny série ostrých (00l) reflexí a pouze slabé (200) a (hkl) reflexe. U všech interkalátů byly vypočteny tetragonální mřížkové parametry.

Charakter vazby mezi molekulami esteru a hostitelem byl studován pomocí IČ spektroskopie. Ve všech případech je C=O valenční vibrace ve spektrech interkalátů posunuta k nižším vlnočtům v porovnání se spektry čistých hostů. To naznačuje, že studované estery jsou k vrstvám hostitele poutány donor-akceptorovou vazbou kyslíku karbonylové skupiny.

Autoři děkují výzkumným záměrům AVOZ 40500505 a MSM 0021627501 za finanční podporu.

2Po46

STUDIUM SUBSTITUČNÍCH A KONDENZAČNÍCH REAKCÍ ORGANOHLINITÝCH SLOUČENIN

Zdeněk Moravec, Marek Nečas, Jiří Pinkas*

Katedra anorganické chemie, PřF MU, Kotlářská 2, 611 37 Brno, jpinkas@chemi.muni.cz

Nehydrolytické procesy jsou studovány jako alternativní metody přípravy nových oxidických a fosfátových materiálů. Jedná se o aprotické kondenzační reakce, kterých se neúčastní hydroxylové skupiny. Během těchto reakcí dochází k eliminaci malých organických molekul (etherů, esterů, alkylhalogenidů atd.).[1]

My jsme se zaměřili na reakce tris(dimethylamido)alanu s estery fosfonových[2] a fosfinových kyselin v bezvodém, aprotickém prostředí. U těchto reakcí byl prozkoumán vliv sterických a elektronových vlastností organického substituentu (Me, CCl_3, Ph, ^{t}Bu) na strukturu vzniklého produktu.

Dále jsme se zabývali reakcemi dichlorethylalanu s alkoholy (cyklohexanolem, n-butanolem a fenolem). Produkty těchto reakcí, chloridy-alkoxidy hlinité, mohou sloužit jako prekurzory pro nehydrolytické přípravy oxidů a fosfátů hlinitých.

Reakce dichlorethylalanu s cyklohexanolem poskytla tři krystalické sloučeniny. Prvním produktem byl čtyřčlenný cyklus $(AlCl_2O^cHex)_2$, ve druhém derivátu si jeden atom hliníku zvýšil své koordinační číslo na pět, koordinací molekuly cyklohexanolu. Třetím produktem byl spirocyklický trinukleární chlorid-alkoxid hlinitý. Ten se podařilo získat ve třech polymorfních modifikacích. Všechny produkty reakcí byly charakterizovány pomocí multinukleární NMR, infračervené a Ramanovy spektroskopie, termické analýzy a rentgenové strukturní analýzy.

Tato práce byla podporována granty MSM 0021622410 a GAČR 203/04/0296.

[1] Vioux A., *Chem. Mater., 9*, 2292 (1997)

[2] Pinkas J., Wessel H., Yang Y., Montero M.L., Noltemeyer M., Fröba M., Roesky H.W., *Inorg. Chem., 37,* 2450-2457 (1998)

2Po47

VIBRAČNÍ SPEKTROSKOPIE SOLÍ AMINOGUANIDINU S KYSELINOU DUSIČNOU

Ivan Němec, Zorka Macháčková, Róbert Gyepes, Zdeněk Mička

Katedra anorganické chemie, Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Hlavova 2030, Praha 2, agnemec@natur.cuni.cz

Intenzivní studium aminoguanidinu a některých jeho solí výpočetními i experimentálními technikami je v první řadě motivováno značným farmakologickým využitím. Nicméně obdobně jako guanidin i aminoguanidin a jeho soli jsou velmi zajímavé také z pohledu přípravy a studia nových materiálů s významnými fyzikálními vlastnostmi, jak optickými, tak i dielektrickými.

V příspěvku diskutované sloučeniny aminoguanidinu s kyselinou dusičnou - tj. dusičnany aminoguanidinia(1+) a aminoguanidinia(2+) byly připraveny v rámci našeho projektu z oblasti materiálového výzkumu zaměřeného na hledání nových nelineárních optických materiálů.

Vzhledem k úspěšnému výpočetnímu určení molekulových struktur aminoguanidinu a jeho kationtů [1] byly i vibrační projevy interpretovány na základě analogických *ab initio* a DFT výpočtů metodami HF/6-31G(d), MP2/6-31G(d), B-LYP/6-31G(d) a B3-LYP/6-31G(d) za použití softwarů Gaussian 98W a GaussViewW 2.1 (fy Gaussian, Inc.).

Pro potvrzení předkládané interpretace vibračních spekter (FTIR a FT Ramanova spektra - rozsah 100-4000 cm^{-1}) byla studována také spektra N,O-deuterovaných analogů.

V závěru příspěvku je diskutován vliv různé protonizace kationtu na vibračně-spektroskopické projevy.

Předkládaná práce byla realizována za podpory grantového projektů GAUK 337/2005/B-CH/PrF.

[1] J.T. Koskinen, M. Koskinen, I. Mutikainen, B. Mannfors, *Z. Naturforsch., 51b*, 1771 (1996).

2Po48

NÁVRH A SYNTÉZA KOMPLEXNÍCH SLOUČENINY ERBIA PRO PŘÍPRAVU AKTIVNÍCH OPTICKÝCH VLNOVODŮ

Jana Ondráčková, Pavlína Třešňáková, Jarmila Špirková

Ústav anorganické chemie,
Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5,
166 28 Praha 6, Česká Republika,
e-mail: jana.ondrackova@vscht.cz

Optické vláknové zesilovače obsahující Er^{3+} jsou dnes již běžně používanou součástí telekomunikačních systémů. Planární zesilovače a vlnovodné lasery jako součástky pro šíření, ovládání a zesilování vedeného optického záření jsou v současné době v popředí zájmu mnoha výzkumných pracovišť. Pro optimální funkci takové optické aktivní struktury je žádoucí, aby byl laserově aktivní prvek přítomen pouze ve funkční oblasti součástky, v našem případě ve vlnovodné oblasti.

V tomto případě byl studován zcela nový způsob přípravy aktivní tenké optické vrstvy difúzí Er^{3+} do porézního silikátového skla. Základním problémem tohoto výzkumu byl návrh, následná syntéza a charakterizace nových koordinačních sloučenin erbia s vlastnostmi vhodnými pro tuto difúzi, tj. komplexy s ligandy s minimálním počtem kyslíkových donorových atomů, které musí být připravovány v nevodném prostředí a musí být po difúzi do porézní podložky snadno rozložitelné tak, aby vzniklé optické vrstvy neobsahovaly hydroxylové skupiny, které způsobují podstatné zkrácení doby života excitovaných stavů Er^{3+}. Dalším požadavkem na vlastnosti připravovaných komplexů, důležitým pro homogenní distribuci Er^{3+} v optické vrstvě, byla přítomnost objemných ligandů. Na základě těchto požadavků byla vybrána následující série ligandů: bipyridyl, diethylentriamin, betadiketony a deriváty chinolinu, a byly syntetizovány příslušné komplexní sloučeniny. Zatím nejlepší optické vrstvy byly získány po sorpci komplexů tris(8-hydroxychinolin)erbitého a tris(acetylacetonáto)erbitého.

2Po49

DOTACE ERBIA DO PORÉZNÍCH SILIKÁTOVÝCH SKEL PRO POUŽITÍ VE FOTONICKÝCH STRUKTURÁCH

Pavlína Třešňáková, Jarmila Špirková, Jana Ondráčková

Ústav anorganické chemie,
Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5,
166 28 Praha 6, Česká Republika,
e-mail: pavlina.tresnakova@vscht.cz

Jedním z velmi perspektivních možností použití tenkých vrstev ve skleněných podložkách jsou aktivní optické vlnovody obsahující laserově aktivní ionty. Pro přípravu aktivních vlnovodů s nízkými optickými ztrátami a co největším optickým ziskem je žádoucí, aby „aktivní“ dopanty byly obsaženy pouze v oblasti vlnovodu. Je-li aktivním dopantem Er^{3+}, pak tyto tenké vrstvy mohou být základními součástmi optických zesilovačů nebo vlnovodných laserů pracujících na telekomunikační vlnové délce 1530 nm.

Byl studován nový způsob přípravy optických vrstev využívající difůzi erbitých iontů do substrátů z porézního silikátového skla. Dotace byla prováděna při laboratorní teplotě difůzí z nevodného roztoku obsahujícího erbitou koordinační sloučeninu, následně byly připravené vzorky sintrovány při vyšší teplotě pro dosažení homogenního povrchu. Pro toto studium byly navrženy a syntetizovány komplexní sloučeniny erbia neobsahující hydroxylové skupiny, které by významným způsobem zkracovaly doby života excitovaných stavů dopantu. Po dotaci byly skleněné vzorky naleštěny a charakterizovány řadou metod se zaměřením na složení připravených optických vrstev a na jejich spektroskopické vlastnosti. Získané výsledky jsou diskutovány z hlediska konkrétních experimentálních postupů a složení jednotlivých komplexů a jejich vlivu na intenzitu a šířku (FWHM) emisního pásu v oblasti 1530 nm. Nejlepších výsledků bylo dosaženo s použitím komplexu tris(8-hydroxychinolin)erbitého.

2Po50

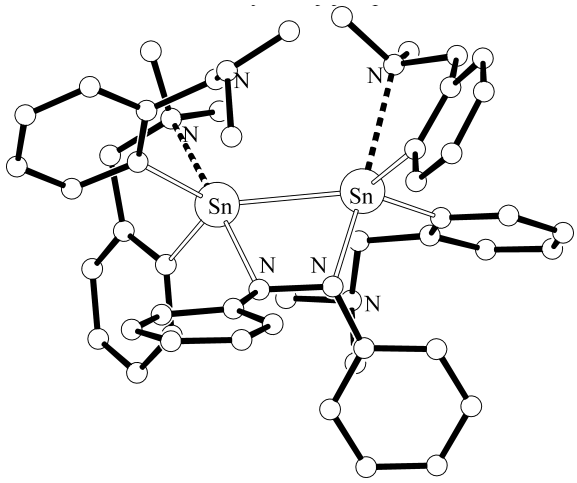
STUDIUM SYNTÉZY A REAKTIVITY ORGANOCÍNATÉ SLOUČENINY OBSAHUJÍCÍ C, N - CHELÁTUJÍCÍ LIGAND

Zdeňka Padělková, Aleš Růžička

Katedra obecné a anorganické chemie,
Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice,
nám. Čs. Legií 565, 532 10 Pardubice
e-mail: ZdeninkaP@seznam.cz.

Organokovová chemie je velmi atraktivním a studovaným oborem dnešní doby, již v minulých deseti letech bylo dosaženo částečného pochopení molekulové a elektronové struktury a bylo nashromážděno množství poznatků o dynamických vlastnostech základních organokovových sloučenin, které se již hojně využívají v průmyslových odvětvích jako katalyzátory, biocidní látky, nebo v lékařských aplikacích. I naše pracoviště se už několik let specializuje na syntézy a řešení vztahů mezi strukturou a dynamickými vlastnostmi komplexních a organokovových sloučenin. U mnohých z těchto sloučenin studuje také katalytickou nebo biologickou aktivitu.

Pozornost řešitelů byla věnována především organocínatým sloučeninám. Byla syntetizována modelová homoleptická organocínatá sloučenina [1, 2] - derivát 2-(*N,N*-dimethylaminomethyl)fenylu, která byla použita jako výchozí sloučenina pro studium reaktivity. Práce byla zaměřena na reaktivitu této sloučeniny s násobnými vazbami azosloučenin (viz. Obr.1), Schiffových bazí a některými komplexy přechodných kovů (Ni, Pd, Pt). Výchozí sloučenina i většina produktů reakcí byla identifikována pomocí NMR a XRD technik. Diskuse bude zaměřena na mechanismus těchto reakcí a strukturální výzkum jejich produktů.



Obr.1: Struktura produktu reakce modelové sloučeniny s azobenzenem

Poděkování: Autoři si dovolují poděkovat GA ČR (203/02/D169) za finanční podporu.

[1] Angermund K., Jonas K., Krüger C., Latten J.L., Tsay Y.-H., *J. Organomet. Chem.*, *353*, 17, (1988).
[2] Abicht H.-P., Jurkschat K., Tzschach A., Peters K., Peters E.-M., von Schnering H.G., *J. Organomet. Chem., 32*6, 357, (1987).

2Po51

AN INTERACTION OF ANTITUMOR ACTIVE VANADOCENE DICHLORIDE WITH SULPHUR CONTAINING AMINO ACIDS

Paláčková Hana[a], Schneiderová Petra[a], Vinklárek Jaromír[a], Frumarová Božena[b]

[a] Department of General and Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice, Czech Republic, e-mail:hana.palackova@upce.cz
[b] Joint laboratory of Solid State Chemistry of Institute of Macromolecular Chemistry of Czech Acad. Sci. and University of Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice, Czech Republic

From recently published studies it follows, that the sulphur containing amino acids can interact with metallocene moiety.[1,2] This interaction can be connected with antiproliferative activity of bent metallocenes. The aim of this work is the explanation of the interaction of vanadocene dichloride (Cp_2VCl_2, VDC) with cysteine and methionine.

Based on EPR spectroscopy it was found that sulphur containing amino acids form three types of complexes. In the case of methionine, only a typical chelate complex [Cp_2V(met)]Cl (**1**) was found after addition of aa into aqueous solution of VDC.

By the reaction of aqueous solution of VDC with equivalent amount of cysteine are formed two different complexes. First of them ([Cp_2V(*O,S*-cys)]Cl, **2a**) was found at pH range 2-4, while the second ([Cp_2V(*N,S*-cys)]Cl, **2b**) at 4-8. The structure of cysteine complexes were assigned on the basis of comparison of EPR parameters of complexes **2a** and **2b** with prepared vanadocene complexes of 3-mercaptopropionic acid ([Cp_2V(*O,S*-$S(CH_2)_2COO$)], **3**) and cysteamine ([Cp_2V(*N,S*-$S(CH_2)_2NH_2$)][BPh_4], **4**). All complexes were isolated and the structure of complex **4** was determined by X-ray diffraction.

This work was supported by grant of University of Pardubice 3310/20/FG 350023.

[1] Waern, J.B. and M.M. Harding, *Inorganic Chemistry 43*(1), 206-213, (2004).
[2] Pérez Y., López V. at al., *J.Biol.Inorg.Chem. 10*, 94-104, (2005).

2Po52

ŘÍZENÁ PŘÍRAVA A ANTIMIKROBIÁLNÍ AKTIVITA KOLOIDNÍCH ČÁSTIC STŘÍBRA

Aleš Panáček[a], Libor Kvítek[a], Milan Kolář[b], Naděžda Pizúrová[c], Taťjana Nevěčná[a]

[A]Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci, Tř. Svobody 26, 77146 Olomouc, Česká republika, email: panacek@prfnw.upol.cz
[B]Ústav mikrobiologie, Lékařská fakulta Univerzity Palackého v Olomouci, Hněvotínská 3, 77515 Olomouc, Česká republika
[C]Ústav fyziky materiálů Akademie věd ČR, Žižkova 22, 61662 Brno, Česká republika

Unikátní fyzikálně chemické vlastnosti kovových částic nanometrových rozměrů jsou příčinou současného dynamického rozvoje nanotechnologií v různých vědních oblastech. Nanočástice poskytují díky své velikosti a morfologii takové specifické vlastnosti, které nejsou u molekul či makroskopických látek pozorovatelné. Různé nanotechnologické aplikační možnosti však kladou odlišné požadavky na vlastnosti nanočástic. Jedním z úkolů současné vědy je tedy vývoj metod pro přípravu částic nanometrových rozměrů s cílenými vlastnostmi, jako je velikost, tvar či distribuce jejich velikostí.

Stříbro je jedním z velmi často používaných kovů v oblasti nanomateriálů díky svým specifickým vlastnostem a snadné přípravě. Metoda řízené přípravy koloidních částic stříbra prováděná na našem pracovišti spočívá v redukci komplexního kationtu $[Ag(NH_3)_2]^+$ vybranými sacharidy.

V poslední době se z důvodu vzrůstající rezistence bakterií vůči antibiotikům věnuje obrovská pozornost baktericidním účinkům stříbrných částic. Stříbrné nanočástice o velikosti jednotek až desítek nanometrů vykazují vysokou antimikrobiální aktivitu vůči více než 650 druhům bakterií včetně některých virů a plísní. Námi připravené koloidní částice stříbra o velikosti jednotek až desítek nanometrů

vykazují poměrně vysokou baktericidní aktivitu vůči bakteriálním kmenům, jako jsou např. Staphylococcus aureus, Enterococcus faecalis, Escherichia coli, Pseudomonas aeruginosa a další.

2Po53

VLIV NÍZKÝCH KONCENTRACÍ KYSLÍKU NA KOROZNÍ PROCESY V PLYNOVODECH A NA ÚČINNOST INHIBITORŮ

Petrů, J., Prokeš O., Sajdl, P.

Ústav Energetiky, FTOP, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6
e-mail: petruj@vscht.cz

Hlavním korozním problémem plynovodů je jejich napadení z vnější strany, ale příčinou mnoha poruch je i poškození z vnitřní strany. Předložená práce se zabývá měřením reálného množství kyslíku v zemním plynu a stanovením účinnosti vybraných inhibitorů koroze.

Měření koncentrací kyslíku probíhala na nízkotlakém rozvodu v laboratoři. Byla prokázána jeho přítomnost ve stopových množstvích do 0,006 obj. % (norma ČSN 386110 udává max. 0,02 obj. % kyslíku).

Zvýšení koncentrací kyslíku, způsobované nestabilitou průtoku plynu, mají charakteristický tvar a lze je snadno identifikovat. Průběh naměřených hodnot svědčí o tom, že k průniku kyslíku do systému dochází v důsledku nestandardních událostí. Jedná se o jednotlivé průniky kyslíku do systému, nikoliv o stabilní kontinuální jev.

Inhibiční účinky byly studovány elektrochemickou metodou měřením polarizačního odporu. Elektrody tvořené ocelovým drátem třídy 11 (ČSN 411373), ze které jsou konstruovány potrubní systémy plynovodů, byly vystaveny koroznímu prostředí s nízkým obsahem kyslíku a působení korozních inhibitorů (3-(2-Imidazolin-1-yl)propyltriethoxysilan, triethanolamin + kyselina abietová, triethanolamin + kyselina skořicová a triethanolamin + kyselina sebaková). Z výsledků provedených experimentů vyplývá vysoká účinnost všech vybraných inhibitorů v agresivních prostředích. Nejvhodnějším inhibitorem byl 3-(2-Imidazolin-1-yl)propyltriethoxysilan, který dosahoval účinnosti 91,5 % při pH 3 a 93,6 % při pH 7.

2Po54

PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE *ANSA*-METALLOCENŮ $Me_2E(C_5H_4)_2MX_2$

Michal Picka, Milan Erben, Jaromír Vinklárek

Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Nám. Čs. Legií 565, Pardubice 532 10; picka.m@seznam.cz

Byly připraveny série metallocenových komplexů[1] typu $Me_2E(C_5H_4)_2MX_2$ (E = C, Si; M = Ti, Zr, X = F, Br, I). Chloridové komplexy $Me_2E(C_5H_4)_2MCl_2$ použité jako výchozí látky byly syntetizovány dle literatury[2], kdy reagoval bis(trimethylstannyl) derivát organického ligandu s MCl_4 v toluenu. Ostatní halogenidové deriváty pak byly získány transhalogenačními reakcemi $Me_2E(C_5H_4)_2MCl_2$ s BBr_3, BI_3 resp. s Me_3SnF v dichlormethanu. Připravené sloučeniny byly charakterizovány pomocí ^1H a ^{13}C NMR, IR a Ramanovy spektroskopie. U komplexů $Me_2C(C_5H_4)_2TiF_2$, $Me_2C(C_5H_4)_2TiBr_2$, $Me_2C(C_5H_4)_2ZrBr_2$ a $Me_2Si(C_5H_4)_2ZrBr_2$ byly získány krystaly použitelné pro rentgenostrukturní analýzu[3].

Centrální atom kovu je ve studovaných molekulách pseudotetraedricky koordinován dvěma cyklopentadienylovými kruhy a dvěma halogenidovými ligandy Vazebné úhly v koordinačním okolí centrálního atomu kovu jsou v porovnání se sloučeninami Cp_2MX_2 výrazně deformovány přítomností krátkého jednočlánkového můstku. Současně jsou deformovány i vazebné úhly kolem můstkového atomu E. Přítomnost jednočlenného ansa-můstku nemá výraznější vliv na vazebné vzdálenosti kov-kruh a kov-halogen. Skupina propylen-2,2-diylová vnáší do struktury větší pnutí a menší prostorové stínění než skupina dimethylsilylová.

[1] Práce byla podporována výzkumným záměrem VZ 0021627501 MŠMT České republiky.
[2] C.S. Bajgur, W.R. Tikkanen a J.L. Petersen, *Inorg. Chem., 24*, 2539-2546, (1985).
[3] M. Picka, I. Císařová, J. Vinklárek a M. Erben, *Acta Cryst. E, 81*, m1266-m1268, (2005).

2Po55

PRÍPRAVA, VLASTNOSTI A BIOLOGICKÁ AKTIVITA AROMATICKÝCH KARBOXYLÁTOV ZINKU

L. Piknová, K. Győryová, J. Chomič, D. Hudecová[1], D. Múdroňová[2], V. Zeleňák, Z. Vargová

Univerzita P. J. Šafárika, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied
Moyzesova 11, 041 54 Košice, piknoval@kosice.upjs.sk
[1]Katedra biochémie a mikrobiológie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, STU Radlinského 9, 812 39 Bratislava,
[2]Univerzita veterinárneho lekárstva, Výskumný ústav veterinárnej medicíny, Komenského 73, 041 83 Košice

Zinok je pre organizmus esenciálnym prvkom a zúčastňuje sa na mnohých biologických procesoch. Niektoré jeho zlúčeniny sú známe svojim využitím v oblasti farmakológie a medicíny [1]. Pomerne málo pozornosti sa doteraz venovalo arylkarboxylovým zlúčeninám zinku s N- a O-donorovými heterocyklickými bioaktívnymi ligandami. Preto sme sa rozhodli preskúmať možnosti prípravy nových aromatických karboxylátov zinku a ich substitučných derivátov s bioaktívnymi ligandami, ktoré sú zaujímavé z fyzikálnochemického, štruktúrneho, biologického a termického hľadiska.

Vyvinuli sme nové syntetické postupy prípravy aroma-

tických karboxylátov zinku (benzoáty a salicyláty) s bioaktívnymi molekulami (alkaloidy purínového typu, nikotínamid a pod.). Študovali sme ich spektrálne a termické vlastnosti. Ukázalo sa, že reakcie medzi aromatickými karboxylátmi zinku a organickými ligandami sú ovplyvnené typom karboxylátu, ako aj bázickými a nukleofilnými vlastnosťami organického ligandu [2].

Štúdium biologických vlastnosti bolo zamerané na stanovenie antimikrobiálnej aktivity na vybraných reprezentantoch G^+ a G^- baktérií, kvasiniek a mycéliových mikromycét. Porovnali sme mieru inhibičnej aktivity komplexov pomocou hodnôt MIC a IC_{50}. Ďalej sme študovali vplyv vybraných komplexov zinku na probiotické baktérie (laktobacily) a patogénne baktérie (Salmonely, Escherichia coli, Staphylococcus aureus) v *in vitro* podmienkach. Ukázalo sa, že niektoré komplexy zinku možno využiť pri vývoji nových preparátov, ktoré by mohli potláčať niektoré baktérie v tráviacom trakte a súčasne slúžiť ako zdroj zinku pre makroorganizmus a zároveň zvýšiť účinnosť probiotík.

Ďakujeme grantovej agentúre VEGA MŠ SR za finančnú podporu projektu č.1/2474/05.

[1] S.S.Krishna, I.Majumdar, N.V.Grishin : Nucleic Acids Research 31, 532(2003)
[2] K.Győryová, J.Chomič, K.Kovářová: J.Thermal Anal.and Cal. 80, 375(2005)

2Po56

PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE NIOBÁTO-DRASELNÝCH BOROFOSFÁTOVÝCH SKEL

Jaroslav Pospíšil, Ladislav Koudelka, Petr Mošner

Katedra obecné a anorganické chemie, Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická,
532 10 Pardubice, Česká republika,
jaroslav.pospisil@upce.cz

V této práci byla připravena tavením při teplotách 1200-1280°C niobáto-draselná borofosfátová skla v kompoziční řadě $50K_2O$-$10B_2O_3$-$40P_2O_5$+xNb_2O_5, kde x = 0-44 mol.% Nb_2O_5. Skla s x = 0-16 byla připravena pomalým chlazením taveniny na vzduchu; u skel s x = 20-44 bylo použito prudké chlazení taveniny mezi dvěma měděnými bloky.

S rostoucím obsahem Nb_2O_5 vzrůstá jak měrná hmotnost, tak i molární objem studovaných skel. Teplota skelné transformace, zjišťovaná metodou termomechanické analýzy, vzrůstá zhruba o 190°C až na 609°C u skla s 44 mol.% Nb_2O_5. Naproti tomu koeficient teplotní délkové roztažnosti klesá z $20x10^{-6}$ na hodnotu $6x10^{-6}$. Z křivek DTA vyplynulo, že všechna skla krystalizují v teplotním rozsahu 338-668°C.

Struktura skel byla studována pomocí Ramanovy spektroskopie. Získaná spektra ukazují, že již malý přídavek Nb_2O_5 do skel (cca 2 mol.%) mění strukturu Ramanových spekter, ve kterých se objevuje výrazný pás 890-899 cm^{-1} odpovídající vibracím izolovaných oktaedrů NbO_6; ve spektrech skel s vyšším obsahem Nb_2O_5 lze nalézt pásy 682 a 830 cm^{-1} charakteristické pro vibrace vazeb Nb-O-Nb vznikajících při propojování izolovaných oktaedrů NbO_6 ve strukturní síti studovaných skel. Vestavování oktaedrů NbO_6 do strukturní sítě borofosfátového skla zvyšuje pevnost vazeb ve skle, což se odráží v růstu teploty skelné transformace a chemické odolnosti skel.

2Po57

IMPACT OF RARE EARTH ELEMENTS ON THE PROPERTIES OF InP-BASED EPITAXIAL LAYERS

O. Procházková*, J. Grym*, J. Zavadil*, K. Žďánský*, M. Kopecká**

** Institute of Radio Engineering and Electronics, Academy of Sciences of the Czech Republic,*
Chaberská 57, 182 51 Praha 8, Czech Republic,
e-mail:olgap@ure.cas.cz
*** Czech Geological Service, Geologická 6, 152 00 Praha 5, Czech Republic*

We report the substantial impact of addition of rare earth elements (REEs) in LPE growth process on structural defects, chemical composition and electro-optical properties of InP- based epitaxial layers. Structural defects were inspected by scanning electron microscopy, chemical composition were monitored by sequential X-ray fluorescence, optical features were characterized by low temperature photoluminescence (PL) spectroscopy, electrical properties were evaluated via the capacitance-voltage and temperature dependent Hall effect measurements.

The addition of all of studied REEs leads to the reduction of structural defect densities and undesirable electrically active impurities [1, 2]. It must be noted, however, that each REE acts in its own way. The impurity concentration was reduced by up to tree orders of magnitude and structural defect density by one and a half order of magnitude, in some cases. PL spectra confirmed the high purity and structural quality of grown layers by resolution of excitonic structure and the possibility to distinguish the band-acceptor from donor-acceptor pair translations. The addition of Ce and Yb does not improve so profoundly the structural and electrical properties; however it has been shown that they are introduced into the host lattice in the form of isoelectric impurity in the In site [3].

This work has been supported by the Grant Agency of the Czech Republic, project No. 102/03/0379.

[1] O. Procházková, J. Zavadil, K. Žďánský, and J. Grym, Material Science and Engineering, Vol. B91-92, pp. 407-411, (2002).
[2] J. Zavadil, O. Procházková, and P. S. Gladkov, Crystal Research and Technology, Vol. 40, pp. 498-502, (2005).
[3] O. Procházková, J. Zavadil, K. Žďánský, and J. Grym, Materials Science Forum, Vol. 480-481, pp.483-488, (2005).

2Po58

SYNTÉZA A VLASTNOSTI BIS(FLUOROSULFURYL)IMIDŮ ALKALICKÝCH KOVŮ

Jiří Příhoda[b], Martin Beran[a],

[a]*Ústav analytické chemie AV ČR, Veveří 97, 611 42 Brno, beran@iach.cz*
[b]*Katedra anorganické chemie PřF MU, Kotlářská 2, 611 37 Brno, prihoda@chemi.muni.cz*

Bis(fluorosulfuryl)imidy alkalických kovů patří k látkám velmi zajímavým jak z teoretického, tak i praktického hlediska. Doposud připravena sůl draselná, rubidná a cesná [1, 2]. Všechny jsou krystalické, nehygroskopické, odolné vůči hydrolýze a vykazují extremně vysokou rozpustnost ve vodě i v polárních organických rozpouštědlech. Bis(fluorosulfuryl)imid draselný vykazuje výhodné elektrochemické vlastnosti, které umožňují jeho použití při výrobě pevných elektrolytů na bázi polyethylenoxidu, které se uplatňují při konstrukci např. lithiových akumulátorů. Cílem práce bylo připravit ty soli alkalických kovů, které ještě připraveny nebyly, a pro soli, jejichž příprava již byla publikována, navrhnout ekonomicky a prakticky výhodnější způsob.

Byly studovány metody přípravy bis(fluorosulfuryl)imidů lithného, sodného, rubidného a cesného. Jako výchozí látka byl ve všech případech použit bis(fluorosulfuryl)imid draselný, jehož levnou a jednoduchou syntézu jsme publikovali nedávno [3]. V případě lithné a sodné soli byly k přípravě použity odpovídající chloristany a reakce byla provedena v acetonitrilu. Avšak tento postup nelze možné aplikovat pro přípravu rubidné a cesné soli, a to pro nerozpustnost příslušných chloristanů v běžných rozpouštědlech. Z tohoto důvodu byla navržen jiný postup. Nejprve byl působením kyseliny chloristé na nitromethanový roztok bis(fluorosulfuryl)imidu draselného připraven volný difluorid kyseliny imido-bis(sírové), který byl podroben reakci s uhličitanem rubidným, případně chloridem cesným.

Připravené soli byly charakterizovány ^{19}F NMR spektroskopií, Ramanovou a infračervenou spektroskopií. U lithné soli byla vyřešena její struktura pomocí rentgenové strukturní analýzy.

[1] Ruff J. K.: *Inorg. Chem. 4*, 1446-1449, (1965)
[2] Ruff J. K., Lustig M.: *Inorg. Synth. 11*, 138-143, (1968)
[3] Beran M., Příhoda J.: *Z. anorg. allg. Chem. 631*, 55-59, (2005)

2Po59

SONOCHEMICKÁ PŘÍPRAVA

Vendula Reichlová, Petr Ostřížek, Jiří Pinkas*

Katedra anorganické chemie, přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Kotlářská 2, 611 37 Brno, jpinkas@chemi.muni.cz

Sonochemie je metoda, která využívá ultrazvuku k iniciaci chemických reakcí. Periodicky se opakující tlakové vlny procházejí kapalinou a na tzv. slabých místech dochází ke vzniku bublinek. Energie ultrazvuku je adsorbována bublinkami, které rostou až do kritické velikosti, kdy nastává adiabatické zhroucení (bublinový kolaps). Imploze je doprovázena místním zvýšením teploty na 2000 K a tlaku na stovky atmosfér. Vytvořené podmínky stačí k destrukci přítomných molekulárních prekurzorů za vzniku nových látek. Zmíněnou metodu lze použít k přípravě oxidů, karbidů a sulfidů v nanoskopické formě.[1]

Studovali jsme přípravu oxidů Fe a Co.[2] Použili jsme vysokovroucí rozpouštědlo tetraethylenglykol dimethylether, který má vhodné fyzikální vlastnosti a ve kterém byly výchozí látky dobře rozpustné. Jako prekurzory jsme použili tris(acetylacetonáto) železitý, kobaltitý a kobaltnatý komplex. Sonochemickou reakcí jsme připravili Fe_2O_3, CoO, Co_3O_4 a vhodnou kombinací prekurzorů i $CoFe_2O_4$. Získané oxidy byly amorfní s velikostí částic od 5 nm do 100 nm. Měrný povrch Fe_2O_3 byl v závislosti na podmínkách reakce v rozmezí 100 až 300 $m^2\ g^{-1}$. Kalcinací amorfních produktů jsme získali krystalické oxidy, které jsme identifikovali pomocí rentgenové práškové difrakce jako Fe_2O_3 (hematit), Co_3O_4 a $CoFe_2O_4$ (spinel).

Všechny získané látky jsme charakterizovali pomocí elementární analýzy, termické analýzy, rentgenové práškové difrakce, infračervené spektroskopie, elektronové skenovací a transmisní mikroskopie a kvalitativní EDAX analýzy.

Tato práce byla podporována granty MSM 0021622410 a GAČR 203/04/0296.

[1] A.Gedanken, *Ultrasonics Sonochem. 11*, 47, (2004)
[2] D. N. Srivastava, N. Perkas, A. Zaban, A. Gedanken, *Pure Appl. Chem. 74*, 1509, (2002)

2Po60

REAKCE OXIDŮ SELENU S PYRIDINEM A PYRIDIN-N-OXIDEM

Richtera Lukáš, Pokluda Aleš, Afonso Armando Francisko, Žák Zdirad, Taraba Jan, Toužín Jiří

Ústav chemie materiálů, Fakulta chemická, Vysoké učení technické v Brně, Purkyňova 118, 612 00 Brno, richtera@fch.vutbr.cz
Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova universita v Brně, Kotlářská 2, 611 37 Brno, touzin@chemi.muni.cz

Selen tvoří několik oxidů se smíšenou valencí - $(Se_2O_5)_n$, *cyklo*-Se_3O_7 a *cyklo*-Se_4O_{10}, které v chemii síry nemají analogii. Již dlouho je však známa sloučenina formulovaná původně jako adukt $SeO_2.SO_3$ [1] o níž dosud nebyly k dispozici žádné strukturní údaje. Rentgenograficky se nám podařilo prokázat, že jde o řetězový polymer strukturně blízce příbuzný $(Se_2O_5)_n$. Za příčinu neexistence oxidů síry se smíšenou valencí lze proto považovat nedostatečnou stabilitu můstků S^{IV}-O-S^{VI}.

Oxid selenový poskytuje reakcí s pyO.HCl adukt $pyO.Se_2O_5$, který je izomerní s $py.Se_2O_6$ představujícím izolovatelný meziprodukt při přípravě $py.SeO_3$ přímou reakcí komponent v kapalném oxidu siřičitém [2]. Strukturu všech tří zmíněných DA-komplexů jsme stanovili rentgenograficky. V případě $py.Se_2O_6$ bylo zjištěno, že z roztoku krystalizuje jako solvát $py.Se_2O_6.SO_2$, který ve vakuu již za laboratorní teploty snadno a kvantitativně uvolňuje solvátovou molekulu SO_2. S pyO reaguje oxid selenový v prostředí nitromethanu za tvorby aduktu $pyO.SeO_3$. Ponechá-li se však reakční směs delší dobu bez vnějšího zásahu, krystalizuje z ní DA-komplex diselenpentaoxidu o složení $(pyO)_2.Se_2O_5$. Strukturu obou těchto aduktů jsme stanovili rovněž rentgenograficky.

Reakcí pyridinu s $(Se_2O_5)_n$ se tvoří DA-komplex $py_2.Se_2O_5$, jehož struktura není dosud známa. Při analogické reakci se *cyklo*-Se_3O_7 štěpí a vedle $py.SeO_2$ se tvoří solvatovaný adukt $py_3.Se_2O_5.py$, v němž jsou na atom Se^{IV} vázány tři molekuly donoru [3]. Podobně se vůči pyridinu chová i $(SSeO_5)_n$, který poskytuje ekvimolární směs $py.SeO_2$ a $py.SO_3$.

[1] Weber R.: Ber., **19** 1886, 3185; Metzner R.: Ann. Chim. Phys., **15** 1898, 232
[2] Toužín J., Bauer P.: Coll. Czech. Chem. Comm., **40** 1975 1296
[3] Toužín J., Chroboková E.: Coll. Czech. Chem. Comm., **40** 1975, 1316; Neplechová K., Žák Z. and Toužín J.: Main Group Chemistry, **2** 1997, 149

2Po61

CHARAKTER POVRCHU TITÁNOVEJ ZLIATINY (Ti6Al4V) VYKAZUJÚCEJ BIOAKTÍVNE CHOVANIE

Dana Rohanová, Renáta Horváthová, Martin Maryška, Aleš Helebrant

Ústav skla a keramiky, Vysoká Škola Chemicko-Technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha, Česká Republika, e-mail: dana.rohanova@vscht.cz

Titánová zliatina je pre svoje výborné mechanické vlastnosti využívaná ako materiál vhodný na implantáciu niektorých častí kostí (totálna endoprotéza, náhrada zubov). Povrch zliatiny sa v prostredí extracelulárnych kvapalín chová inertne, teda s okolím významne nereaguje. Pri niektorých aplikáciách sa ale vyžaduje, aby sa implantát pevne viazal s okolitým kostným tkanivom. Preto sa jeho povrch musí upraviť tak, aby vykazoval tzv. bioaktívne chovanie (tvorba pevnej väzby s kosťou v čo najkratšej dobe a bez nežiadúceho zapuzdrenia mäkkým tkanivom). Kostné tkanivo je tvorené hydroxyapatitovým (HAp) minerálom, logicky je teda najvýhodnejšie, keď i novo-vytvorená medzivrsta má charakter apatitu. V literatúre [1-3] sú popísané spôsoby predúpravy titánu a jeho zliatin, ktoré vedú k rastu apatitovej vrstvičky na ich povrchu. Testované sú napr. metódy plazmového nanášania syntetického HAp, bioaktívnych skiel, metódy sol-gel i jednoduché expozície chemicky upraveného povrchu v roztokoch vápenatých a fosforečnanových solí. Chemickou úpravou v silných kyselinách (HF, H_2SO_4,.....) a následne v roztoku NaOH sa na povrchu Ti-zliatiny docieli vznik titaničitého gélu, tvoreného Ti-OH skupinami. OH- skupiny a Na^+ ióny (prítomné v dôsledku pôsobenia roztoku NaOH) sú schopné sa z jeho povrchu vymieňať v prostredí telesných tekutín s Ca^{2+} a $(PO_4)^{3-}$. Takto inkorporované Ca^{2+} a $(PO_4)^{3-}$ ióny tvoria amorfnú bázu kalciumfosfátu. Dlhodobejšia expozícia v extracelulárnej kvapaline (pri in vitro testoch v simulovanej telesnej tekutine (SBF)) podporí metamorfózu kalciumfosfátov a neskoršiu kryštalizáciu apatitu.

V prezentovanej práci je diskutovaná chemická úprava povrchu Ti-zliatiny, mechanizmus tvorby gélovej medzivrstvy, jej charakter a možnosti rastu apatitu. K štúdiu povrchových dejov boli využívané metódy povrchových analýz: optický mikroskop, SEM/EDS a ESCA.

Tato práce byla řešena v rámci grantu GAČR - GA 106/03/0500.

[1] KIM H.-M., MIYAJI, F., KOKUBO,T. et al.: Graded surface of bioactive titanium prepared by chemical treatment., J. Biomed. Mat. Res., 42(2) (1999) 100-107.
[2] KOKUBO,T. ,et al.: Novel bioactive materials with different mechanical properties, Biomaterials 24 (2003) 2161-2175.
[3] WEN, C.B.,DE WIJN.,J.R., LIU,Q., et al: A simple method to prepare calcium phosphate coatings on Ti6Al4V, J. of Mater. Science: Materials in Med. 8, (1997) 765-770.

2Po62

CHARAKTERIZACE SMĚSNÝCH OXIDŮ Co A Mn PŘIPRAVENÝCH TEPELNÝM ROZKLADEM SLOUČENIN TYPU HYDROTALCITU

Tomáš Rojka[1], František Kovanda[1], Vladimír Machovič[2], Tomáš Grygar[3]

[1] Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav chemie pevných látek, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika, Tomas.Rojka@vscht.cz
[2] Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, CL - Laboratoř molekulové spektroskopie, Vladimir.Machovic@vscht.cz
[3] Ústav anorganické chemie AV ČR, 250 68 Řež, Česká republika, grygar@iic.cas.cz

Z hlediska využití produktů tepelného rozkladu vrstevnatých sloučenin typu hydrotalcitu (např. v heterogenní katalýze) je důležitá znalost fázového složení vznikajících směsných oxidů. Srážecí reakcí byly připraveny prekurzory typu Co-(Mg)-Mn-(Al) s různými molárními poměry kationtů Co:Mg:Mn:Al (4:0:2:0; 4:0:1,5:0,5; 4:0:1:1; 4:0:0,5:1,5; 4:0:0:2; 2:0:2:2; 2:2:2:0 a 2:2:1:1). Ke sledování změn fázového složení v závislosti na kalcinační teplotě byly využity prášková rentgenová difrakční analýza a termická analýza pro měření *in situ* a FTIR a Ramanova spektroskopie pro charakterizaci produktů kalcinace. Všechny sledované prekurzory se dehydratovaly při teplotě 100 - 250 °C při zachování vrstevnaté struktury a rozkládaly při 200 - 300 °C za vzniku směsi oxidických fází se spinelovou strukturou a rtg amorfní hmoty. Na základě vyhodnocení difrakčních dat bylo zjištěno, že s rostoucí kalcinační teplotou vzrůstá obsah krystalické fáze v kalcinačních produktech a velikost primárních krystalů. Podrobná analýza Ramanových spekter prokázala, že u vzorků s vysokým obsahem Co dochází při nižších kalcinačních teplotách k odmíšení spinelu s vysokým obsahem Co (Co_3O_4 nebo mírně dopovaný $(Co_{1-x}M^{III}_x)_3O_4$, kde M^{III} = Mn a/nebo Al). V teplotním intervalu 300 - 800 °C byla zřejmá postupná krystalizace oxidů a snižoval se relativní obsah spinelu s vysokým podílem Co. Při teplotách 800 - 1000 °C docházelo k částečnému rozpadu spinelů za vzniku kubických oxidů CoO nebo (Co,Mg)O.

Tato práce vznikla s finační podporou MŠMT ČR (VZ č. MSM 6046137302) a GA ČR (granty č. 104/04/2116 a 106/05/0366).

2Po63

STUDIUM HYDRATACE ALKALICKY AKTIVOVANÉ STRUSKY

Pavel Rovnaník[a], Ámos Dufka[b], Jan Novák[b]

[a]Ústav stavební mechaniky FAST VUT v Brně, Veveří 95, 602 00 Brno, e-mail: rovnanik.p@fce.vutbr.cz;
[b] Ústav technologie stavebních hmot a dílců FAST VUT v Brně, Veveří 95, 602 00 Brno, e-mail: dufka.a@fce.vutbr.cz; novak.j@fce.vutbr.cz;

Alkalicky aktivované strusky (AAS) představují stavební pojivo, které má odlišné vlastnosti v porovnání s pojivy na bázi portlandského slínku. AAS se vyznačují krátkou dobou tuhnutí, vysokými pevnostmi, korozní odolností a odolností proti působení vysokých teplot [1,2].

Pro studium byla vybrána vysokopecní granulovaná struska (ISPAT NH, a.s., Ostrava) s měrným povrchem 380 m^2/kg, obsahující 32,7 % SiO_2 a 6,6 % Al_2O_3. Alkalickým aktivátorem byl sušený silikát sodný PORTIL A (Henkel, SRN) se silikátovým modulem M_s = 2,03. Zkušební tělesa o velikosti 20◊20◊100 mm byla vyrobena z pasty s poměrem komponent struska/aktivátor = 5:1 a vodním součinitelem 0,4.

Vzorky past byly v časech 1, 3, 7, 14, 28, 60, 90 a 120 dní vždy vysušeny do konstantní hmotnosti z důvodu zastavení hydratační reakce a podrobeny analýze pomocí chemických a fyzikálně-chemických metod.

Výsledky termogravimetrické a rentgenové difrakční analýzy potvrdily tvorbu CSH(I) gelu, ale také krystalických fází jako jsou hydrotalcit a AFm fáze. Z výsledků elementární analýzy vodných výluhů dále vyplývá, že během procesu tuhnutí dochází k postupnému zabudovávání alkálií (Na^+) do struktury pojiva, kdežto obsah volného křemíku v pórovém roztoku ve formě SiO_4^{4-} iontů se výrazně nemění. Postupná hydratace strusky se projevuje rovněž snižováním pH hodnot připravených výluhů z hydratovaných vzorků.

Tato práce byla finančně podporována grantem GA ČR 103/04/0139.

[1] Rovnaníková, P., Bayer, P., Pavlas, R., Non-Traditional Cement and Concrete, Brno (2002), pp. 43, ISBN 80-214-2130-4.
[2] Roy, D. M., *Cem. Concr. Res. 29*, 249 (1999).

2Po64

PRÍPRAVA A VLASTNOSTI INTERKALAČNÝCH ZLÚČENÍN MONTMORILLONITOV PRIPRAVENÝCH REAKCIOU TUHÁ FÁZA - PLYN

[a]E. Rudinská, [a]E. Jóna , [a]M. Sapietová, [b]V. Jorík

[a] Katedra chémie a technológie anorganických materiálov, Fakulta priemyselných technológii, TnU AD ,I.Krasku 491/30, 020 01 Púchov; rudinska@fpt.tnuni.sk, jona@fpt.tnuni.sk,
[b] Katedra anorganickej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita, SK-812 37 Bratislava; vladimirjorik@stuba.sk

Montmorillonit patrí do skupiny vrstevnatých silikátových minerálov - smektitov. Záporný náboj vrstiev sa vyrovnáva vymeniteľnými hydratovanými katiónmi, pričom polárne organické molekuly môžu nahradiť molekuly vody, ktoré sa nachádzajú v medzivrstvovom priestore montmorillonitu. Zavedením prechodného katiónu kovu a pridaním vhodného ligandu sa v medzivrstvovom priestore formujú interkalačné zlúčeniny. Keďže povrch montmorillonitu je obsadený Brönstedovými a Lewisovskými kyslými miestami, interakcie medzi ílom a organickou zlúčeninou sú acido-bázického typu [1-3].

Práca sa zaoberá zisťovaním vzniku interkalačných produktov pyridínu, 4-metylpyridínu (4-Mepy) a 4-etylpyridínu (4-Etpy) do medzivrstvového priestoru Cu(II)-montmorillonitu. Úspešná interkalácia týchto zlúčenín cez koordináciu medzivrstvového Cu^{2+} katiónu sa potvrdila pomocou infračervenej spektroskopie a röntgenovej práškovej difrakčnej analýzy. Ukázalo sa, že väzby medzi derivátmi pyridínu a prechodným kovovým iónom v montmorillonite majú prevažne Lewisovsky kyslý charakter. Prezentovaná interkalácia tuhá fáza - plyn pyridínových derivátov a tvorba interkalátových komplexov v silikátových vrstevnatých mineráloch vytvára možnosť prípravy rôznych koordinačných zlúčenín, ktoré sa nedajú získať bežnými metódami. Ukázalo sa, že tieto a analogické interkalačné zlúčeniny vykazujú špecifické vlastnosti využiteľné v oblasti katalýzy, životného prostredia a ako plnivá do plastov a vlákien.

[1] N. Khaorapapong, K. Kuroda, H. Hashizume and M. Ogawa, *Aplied Clay Science,19*, 69,(2001)
[2] M. Ogawa and K. Kuroda, *Bull.Cem.Soc.Jap., 70*, 2593 (1997)
[3] S. Yariv, T*hermochim.Acta, 274,* 1, (1996)

2Po65

STANOVENIE c_p VYSOKOOLOVNATEJ SKLÁRSKEJ VSÁDZKY A ŠTÚDIUM JEJ PREDOHREVU ODPADNÝM TEPLOM SPALÍN

G. Rudinská[a], D. Ondrušová[a], M. Liška[b], P. Šimonc

[a] Fakulta priemyselných technológii Púchov, TnU AD Trenčín, KCHTAM, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov, rudinskag@fpt.tnuni.sk, ondrusova@fpt.tnuni.sk
[b] Centrum kompetencie skla Vitrum Laugaricio, TnU AD, Študentská 2, 911 50 Trenčín,
[c] Katedra fyzikálnej chémie, Fakulta chemickej a potravinárkej technológie, STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, peter.simon@stuba.sk

Práca pojednáva o stanovení závislostí $c_p = f(T)$ pre jednotlivé komponenty sklárskej vsádzky, ktorá je súčasne skúmaná z hľadiska možnosti jej predohrevu odpadným teplom spalín. Proces tavenia skla je energeticky veľmi náročný a možnosť predohrevu sklárskej vsádzky je jeden zo spôsobov dosiahnutia energetických úspor v procese tavenia skla. Kontaktný predohrev sklárskej vsádzky spalinami je účinnejšou metódou úspory energie ako predohrievanie spaľovacieho vzduchu a prináša zo sebou výhody najmä v ekonomickej oblasti, reprezentovanej hlavne energetickou úsporou, príp. možným zvýšením výkonu taviaceho agregátu [1,2].

Množstvo ušetreného tepla bolo vypočítané na základe Fourierovej rovnice prestupu tepla pre prípad najťažšie ohrievajúceho sa bodu uprostred častice sklárskej vsádzky. Metódou diferenciálnej kompenzačnej kalorimetrie (DSC) boli jednotlivé sklárske suroviny merané v teplotnom intervale 50 - 400°C, ktorý zahŕňal teplotu predohrevu (394°C).

Na základe výsledkov termoanalytických meraní boli vypočítané hodnoty pravých špecifických tepelných kapacít c_p v závislosti od teploty T. Empirické rovnice závislostí $c_p = f(T)$ pre jednotlivé komponenty študovanej sklárskej vsádzky sa získali na základe hodnôt pravých c_p s použitím regresnej analýzy. Všeobecný tvar empirickej rovnice závislosti $c_p = f(T)$ je daný vzťahom:

$$c_p(T) = a + bT + cT^2 + dT^{-2}$$

kde a, b, c, d sú koeficienty a T je teplota.

[1] JEŠKO, K., *Sklář a Keramik, ročník 42,* 327, (1992)
[2] Van LIMPT, H.: *Glass International, č.11,* 13, (2002)

2Po66

ŠTÚDIUM INTERAKCIE Fe(III) A Ni(II) FORMY MONTMORILLONITU S BENZIMIDAZOLOM V CELOM ROZSAHU pH

M. Sapietová[a], V. Luptáková[b], E. Jóna[a], E. Rudinská[a]

[a)]Katedra chémie a technológie anorganických materiálov, Fakulta priemysejných technológií, Trenčianska Univerzita Alexandra Dubčeka v Trenčíne, I.Krasku 491/30, 020 01 Púchov, sapietova@fpt.tnuni.sk, jona@fpt.tnuni.sk
[b)]Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava 4

Ílové minerály predstavujú podstatnú časť pôdneho horizontu, ktorý je dôležitý pre existenciu ľudstva. Jedným z ílových minerálov známych pod názvom smektity je montmorillonit s expandujúcou vrstevnatou štruktúrou [1, 2].

Predmetom predkladanej práce bolo štúdium M-montmorillonitu (M = Fe(III), Ni(II)) s aromatickými heterocyklickými zlúčeninami (benzimidazol) v celom rozsahu pH. Cieľom bolo zistiť možnosť koordinácie benzimidazolu ako katiónu, neutrálnej molekuly a aniónu. Vzniknuté organomontmorillonity sa pripravili adsorpciou vodných roztokov benzimidazolu na Fe(III) a Ni(II) monmtorillonit. Pri adsorpcii sa použil nielen roztok benzimidazolu bez úpravy pH, ale aj roztoky, ktorých pH sa upravilo na 2 a 12. V kyslej oblasti pH dochádzalo k iónovej výmene, v neutrálnej a zásaditej oblasti dochádzalo ku koordinácii neutrálnych molekúl benzimidazolu na vymeniteľný katión.

Na identifikáciu organomontmorillonitov sa použili infračervená spektroskopia, RTG difrakčná analýza a elementárna analýza.

Montmorillonit sa vyznačuje svojimi vynikajúcimi katalytickými a sorpčnými vlastnosťami. Interkaláciou organických zlúčenín do medzivrstvia montmorillonitu sa môže zvýšiť katalytická aktivita a životnosť katalyzátora [3].

[1] Číčel B., Novák I., Horvát I.: *Mineralógia a kryštalochémia ílov.* Veda, Bratislava 1981
[2] Šucha V.: *Íly v geologických procesoch,* UK, Bratislava 2001
[3] Varma R.S.: *Tetrahedron, 58*, 1235 (2002)

2Po67

STUDIUM REAKCÍ SILYLDERIVÁTŮ LINEÁRNÍCH FOSFAZENŮ S HALOGENIDY KOVŮ I NEKOVŮ, PŘÍPRAVA HETEROCYKLŮ FOSFAZENOVÉHO TYPU, STUDIUM JEJICH REAKTIVITY A STRUKTURY

I. Seitlová, J. Taraba, Z. Žák

Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity v Brně, Kotlářská 2, 611 37 Brno

V současnosti se v celé oblasti chemie projevuje stále větší snaha o syntézu nových látek. Jednak proto, abychom lépe poznali souvislosti mezi strukturou, reaktivitou a vlastnostmi sloučenin a také proto, abychom jejich nové vlastnosti využili v praxi. Toto platí i pro sloučeniny fosforu a dusíku s vazbami M-N=P; M = S, B, As, Ga a další.

V roce 1993 publikovali francouzští chemici P. Hemmoutu a J. Heubel své výsledky studia reakce chloridu fosforečného s hexamethyldisilazanem (HMDSA).[1] Vyplývá z nich, že PCl_5 reaguje s HMDSA nejdříve na „silylovaný“ monofosfazen ($Cl_3P{=}N\text{-}SiMe_3$) a vlivem tepelné nestability produktu dále vznikají oligomerní fosfazenové produkty. Následnými reakcemi těchto produktů a jejich studiemi ^{31}P-NMR se zabýval R. Allcock a A. Crane.[2] Na tyto práce navazuje náš výzkum zabývající se metodami přípravy „disilylovaného difosfazenu“ sumárního vzorce ($Me_3Si\text{-}NH\text{-}PCl_2{=}N\text{-}PCl_2{=}N\text{-}SiMe_3$) a studiem jeho reaktivity a struktury.

„Difosfazen“ obsahuje dvě koncové (H)N-$SiMe_3$ skupiny a proto ho lze použít jako reaktant v desilylačních reakcích s kovalentními halogenidy ($SOCl_2$, SO_2Cl_2, BCl_3, $AsCl_3$, $GaCl_3$…) za vzniku heterocyklů fosfazenového typu.

Výše uvedený způsob přípravy šestičetných heterocyklických látek je svým způsobem ojedinělý. Ze srovnání s jinými metodami přípravy těchto produktů [3, 4] vyplývá, že pomocí námi navrženého postupu se dají heterocykly připravit ve větším výtěžku i čistotě. Souborný přehled oblasti metod přípravy anorganických heterocyklických látek uvedl ve své souborné práci M.Witt. [5]

Pro analýzu molekulové a krystalové struktury byla využita rentgenová strukturní analýza i další dostupné analytické techniky (^{1}H, ^{13}C, ^{31}P-NMR, IR, RA atd.).

[1] Hemmoutu P., Heubel J., *Phosphorus, Sulfur, Silicon,* 79, 97, (1993)
[2] Allcock R., Crane A., *Inorg. Chem., 38*, 280, (1999)
[3] Becke-Goehring M., Bayer K., Mann T., *Z. Anorg. Allg. Chem.* 346, 143, (1966)
[4] Nuber B., Ziegler M. L., *Z. Naturforsch.* B 32, 134, (1977)
[5] Witt M., Roesky H. W., *Chem. Rev.* 94, 1163, (1994)

2Po68

AB INITIO STUDY OF STRUCTURAL CHANGES IN LIZARDITE-1T: {Si^{4+}/Al^{3+}}, {Si^{4+}/Fe^{3+}}, [Mg^{2+}/Al^{3+}], [Mg^{2+}/Fe^{3+}] SUBSTITUTIONS

Eva Scholtzová

Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, SK-845 36 Bratislava, Slovak Republic, uacheva@savba.sk

Geometrical changes induced by cation substitutions {Si^{4+}/Al^{3+}}[Mg^{2+}/Al^{3+}], {$2Si^{4+}/2Al^{3+}$} [$2Mg^{2+}/2Al^{3+}$], {Si^{4+}/Fe^{3+}} [Mg^{2+}/Al^{3+}] or [Mg^{2+}/Fe^{3+}], where {} and [] indicate tetrahedral and octahedral sheet in lizardite 1*T*, are studied by ab-initio quantum chemistry calculation. The majority of the models are based on the chemical compositions reported for various lizardite polytypes with the amount of Al in the tetrahedral sheets reported to vary from

3.5 - 8% in the 1T and $2H_1$, up to ~30% in the $2H_2$ polytype. Si^{4+} by Fe^{3+} substitution in the tetrahedral sheet with an Al^{3+} (Fe^{3+}) in the role of a charge compensating cation in the octahedral sheet is also examined. The cation substitutions result in the geometrical changes in the tetrahedral sheets, while the octahedral sheets remain almost untouched. Substituted tetrahedra are tilted and the their basal oxygens pushed down from the plane of basal oxygens. Ditrigonal deformation of tetrahedral sheets depends on the substituting cation and the degree of substitution [1].

[1] Scholtzová E, Smrčok L, *Phys Chem Mineral,* (2005) accepted

2Po69

MODIFIKACE POLYMERU LASEROVÝM ZÁŘENÍM

P. Slepička, V. Švorčík

Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická, 166 28 Praha, Česká republika, tel. (+420)22044-5159, e-mail: petr.slepicka@vscht.cz,

Povrch polymeru byl modifikován laserovým zářením. Pro experimenty byl vybrán PET (polyethylentereftalát). Polymer byl modifikován ArF laserem(vlnová délka 193 nm) a F_2 (157 nm) laserem. Modifikace probíhala v normální atmosféře (ArF) a atmosféře dusíku (případ F2 laseru). Laserový paprsek byl polarizován pomocí Brewstewrova plátku a MgF_2 polarizátoru. Modifikace probíhala scanováním laseru po povrchu polymeru (vzorek byl umístěn na pohyblivé podložce). Byly studovány různé rychlosti scanování. Jako optimální byla vybrána rychlost 6.25 mm/sec. Vzorky byly modifikovány při různých energetických tocích a různých úhlech dopadu laserového svazku. Poté byl studován povrch PET pomocí AFM (mikroskopie atomárních sil) s cílem zjistit morfologii povrchu ozářeného polymeru. Po ozáření vzorku na jeho povrchu vznikájí interferenční obrazce (nejčastěji linie, mohou být i bodové struktury) proměnné šířky a hloubky, v závislosti na použitém typu záření a dávky energie. Pro případ ArF laseru je průměrná šířka interferenčních linií 160 nm, pro F_2 laser pak cca 130 nm. Na takto modifikované polymery budou deponovány kovové vrstvy a studována jejich adheze, elektrické vlastnosti a povrchová morfologie. Modifikované polymery mohou najít rovněž uplatnění v bioinženýrství při studiu růstu a kompatibility buněk.

Autoři děkují za finanční podporu projektu GAČR č. 102/03/0449.

2Po70

KOORDINAČNÍ SLOUČENINY LANTHANOIDŮ S BIDENTÁTNÍMI P-C-P LIGANDY

Zdeněk Spíchal, Marek Nečas

Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta MU v Brně, Kotlářská 2, 611 37 Brno, Česká republika, zspichal@mail.muni.cz

Reakcemi solí lanthanoidů s bidentátními ligandy vzorce $Ph_2P(O)(CH_2)_nP(O)Ph_2$ jsme připravili dimerní (ligand s n = 4) a polymerní (ligandy s n = 2 a 6) sloučeniny. S ohledem na nerozpustnost většiny produktů jsme pro studium jejich struktury použili zejména RTG strukturní analýzu. Příprava monokrystalů vyžadovala různé syntetické metody, z nichž nejvhodnější se ukázala být solvotermální syntéza v methanolu.

$Ph_2P(O)(CH_2)_2P(O)Ph_2$ poskytuje se solemi lanthanoidů dvourozměrné koordinační polymery různých architektur, „parquet floor“, „brick wall“ a „pseudo honeycomb“. Toto uspořádání je ovlivněno syntetickou metodou, aniontem výchozí soli lathanoidu a rovněž lanthanoidovou kontrakcí. [1]

$Ph_2P(O)(CH_2)_4P(O)Ph_2$ reaguje s dusičnany lanthanoidů za tvorby dvoujaderných komplexů. Ligandy $Ph_2P(O)(CH_2)_4P(O)Ph_2$ jsou vázány chelátovým i můstkovým způsobem.

$Ph_2P(O)(CH_2)_6P(O)Ph_2$ s dusičnany lanthanoidů vytváří kladně nabité dvourozměrné sítě. Strukturní motiv polymerní vrstvy nejblíže odpovídá šestiúhelníkové síti, protažené v jednom směru.

Další pozornost věnujeme aplikovanému výzkumu, zejména na poli luminescence a porézních materiálů. Lanthanoidy vykazují luminescenční vlastnosti, které mohou být použitím vhodných ligandů příznivě ovlivněny. Určité typy ligandů mohou vést ke tvorbě porézních koordinačních polymerů, které nalézají využití v separačních technikách a katalýze.

[1] Z. Spichal, M. Necas, J. Pinkas, *Inorg. Chem., 44*, 2074-2080, (2005)

2Po71

NOVÉ ARYLFOSFONÁTY KOVŮ ALKALICKÝCH ZEMIN

Jan Svoboda , Vítězslav Zima, Klára Melánová, Ludvík Beneš

Společná laboratoř chemie pevných látek ÚMCh AV ČR a Univerzity Pardubice
Studentská 84, 532 10 Pardubice,
email: Jan.Svoboda@upce.cz

Připravili a charakterizovali jsme několik nových vrstevnatých arylfosfonátů vápníku, stroncia a barya. K jejich přípravě a ke studiu jejich chování v prostředí s různou aciditou jsme využili námi vyvinutou metodu počítačem řízeného přídavku činidla. Nově připravený

fenylfosfonát vápníku $Ca(O_3PC_6H_5).2H_2O$ v přítomnosti kyseliny fenylfosfonové přechází na $Ca(HO_3PC_6H_5)_2$ přes intermediát $Ca_3(C_6H_5PO_3H)_2(C_6H_5PO_3)_2.4H_2O$. Reakcí $Ca(O_3PC_6H_5).2H_2O$ při 180°C za hydrotermálních podmínek se podařilo připravit monohydrát fenylfosfonátu vápníku $Ca(O_3PC_6H_5).H_2O$, který je strukturně odlišný od výchozího dihydrátu.

Dále jsme připravili fenylfosfonáty vápníku s karboxy skupinou v para poloze, jmenovitě $Ca(HO_3PC_6H_5COOH)_2$ (**A**) a $Ca_3(O_3PC_6H_5COO)_2.6H_2O$ (**B**). Sloučenina **A** vzniká při nízkém pH, zatímco **B** při pH okolo 8. V kyselém prostředí přechází sloučenina **B** na látku **A**. Naopak v prostředí amoniaku lze ze suspenze látky A připravit látku **B**.

Reakcí kyseliny fenylfosfonové s barnatou solí v zásaditém prostředí se podařilo připravit novou látku se vzorcem $BaC_6H_5PO_3.2H_2O$. Rozdílný basal spacing nasvědčuje tomu, že se jedná o látku strukturně odlišnou od $Ca(O_3PC_6H_5).2H_2O$. V kyselém prostředí tento fenylfosfonát barya přechází na dříve popsanou látku se vzorcem $Ba(C_6H_5PO_3H)_2$. Strontnaté soli vytvářejí v zásaditém prostředí s kyselinou fenylfosfonovou sloučeninu se vzorcem $Sr_2(C_6H_5PO_3)(C_6H_5PO_3H)_2.3.5H_2O$. V kyselém prostředí tato sloučenina přechází na látku s molárním poměrem Sr/P = 1/4. Její charakterizace se v současnosti provádí.

Autoři děkují výzkumným záměrům MSM0021627501 a AVOZ40500505 za finanční podporu.

2Po72

MOŽNOSTI VYUŽITÍ KARBOCHEMICKÝCH SUROVIN PRO PŘÍPRAVU UHLÍKOVÝCH MEMBRÁN

Petr Ševčík, Ivan Koutník

Vysoká škola báňská - Technická univerzita Ostrava, Fakulta metalurgie a materiálového inženýrství, katedra chemie, Tř.17. listopadu 15, 708 33 Ostrava - Poruba, petr.sevcik2.fmmi@vsb.cz

V poslední době je velká pozornost věnována přípravě uhlíkatých membrán, které by umožnily membránové separace v agresivních prostředích. V současnosti požívané keramické membrány mají obvykle nízkou permselektivitu a jsou velmi drahé. V neagresivních prostředích se běžně používají relativně levné polymerní membrány s dobrými permselektivními vlastnostmi[1]. Uhlíkaté membrány, většinou připravované z čistých látek, mají lepší permselektivní vlastnosti než keramické a na rozdíl od polymerních odolávají agresivním prostředím. Jejich cena se však uvádí o jeden až tři řády vyšší než u polymerních. Pro přípravu uhlíkatých membrán je proto třeba hledat co nejlevnější suroviny a jednoduché postupy, které však budou poskytovat membrány požadovaných vlastností[2]. Membrány popisované v tomto příspěvku byly připraveny s použitím koksu, koksového odprachu, petrolkoksu a smolného koksu. Technologie přípravy sestávala z řízené karbonizace hmoty připravené mísením uvedených surovin v práškové formě s černouhelnou smolou S90 jako pojidlem a následným lisováním ve vyhřívané formě.

[1] Ismail, A.F., David, L.I.B. Journal of Membrane Science 193, 1 (2001)
[1] S.M. Sau., A.F. Ismail, Carbon 42, 241-259(2004)

2Po73

NOVÉ DUSÍKOFOSFOREČNÉ HETEROCYKLY

Richard Ševčík, Jiří Příhoda

Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity v Brně, Kotlářská 2, Brno, 611 37, Česká Republika, email: sevcik@chemi.muni.cz, prihoda@chemi.muni.cz

Reakcí pyridiniumbetainu kyseliny chlorodithiofosforečné ($py.PS_2Cl$) s monosubstituovanými deriváty thiosemikarbazidu $RN(H)C(S)N(H)NH_2$ (R = Me, Et, Ph) byly připraveny heterocyklické sloučeniny s pětičetnými P-N-C-N-N kruhy [1] nesoucí příslušné organické substituenty (Me, Et, Ph). Avšak při studiu reakce py.PS2Cl s 4-*iso*-propylthiosemikarbazidem byl také izolován neočekávaný bicyklický produkt s kondenzovanými P-N-C-N-N kruhy - bis(pyridinium) 2,6-di-*iso*-propyl-1,5-disulfido-1,5-dithioxo-3,7-dithioxo-1,2,4,3λ^5-triazafosfolo[2,1-a]-1,2,4,3λ^5-triazafosfol (**I**). Pro vysvětlení vzniku této sloučeniny byl navržen mechanismus, jehož prvním reakčním krokem je degradace výchozího 4-*iso*-propylthiosemikarbazidu za vzniku hydrazindithiokarbo(*iso*-propyl)amidu. Při jeho reakci s $py.PS_2Cl$ nejprve dochází ke vzniku substituovaného pětičlenného P-N-C-N-N kruhu, který zřejmě probíhá obdobným mechanismem jako reakce py.PS2Cl s monosubstituovanými deriváty thiosemikarbazidu. V závěrečném reakčním kroku pak tento meziprodukt reaguje s další molekulou py.PS2Cl a poskytuje výslednou bicyklickou sloučeninu se dvěma kondenzovanými P-N-C-N-N kruhy. Aby bylo možné objasnit celý mechanismus vzniku látky (**I**), bylo nutné provést reakce $py.PS_2Cl$ se substituovanými deriváty thiosemikarbazidu a hydrazindithiokarboamidu a charakterizovat pomocí fyzikálně-chemických metod (RTG, NMR, RA, IR) jednotlivé sloučeniny, které jsou předpokládanými články reakčních mechanismů. Ze získaných poznatků pak bylo možné navržený mechanismus s jistotou potvrdit.

[1] Ševčík R., Příhoda J., Nečas M., *Polyhedron,* přijato k publikaci

2Po74

TERMICKÁ POLYKONDENZACE SMĚSÍ KARBOCHEMICKÝCH KOMPONENT

Věra Šugárková, Pavel Baran, Eva Plevová *

Vysoká škola báňská - Technická univerzita Ostrava, Centrum pokročilých inovačních technologií, Tř. 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava - Poruba, vera.sugarkova@vsb.cz
** ÚGN AV ČR, Studentská 1768, Ostrava - Poruba 708 33, Česká republika*

V současné době dochází k poklesu produkce karbochemických produktů a proto jsou v sledovány nové způsoby přípravy průmyslového uhlíku a jeho dalších forem, používaných v řadě výrobních procesů (např.výroba elektrod, uhlíkových vláken). Jednou z těchto variant je řízená termolýza vhodných prekurzorů, jejímž cílem je zmíněnou surovinovou bázi rozšířit [1]. Avšak nejen z tohoto důvodu je práce zaměřena na sledování interakčních procesů, v jejichž důsledku mohou vznikat produkty s vyšší užitnou hodnotou, jejichž vyšší zastoupení ve finální produkci při procesu zpracování černouhelného dehtu by bylo vítáno vzhledem k rostoucímu zájmu na trhu.

Dalším aspektem je skutečnost, že složky obsažené v dehtu, tvořící širokou paletu organických sloučenin zahrnujících i významné množství kyslíkatých, dusíkatých a sirných sloučenin, jsou často vystavovány tepelné expozici a také působení vzdušného kyslíku. Přitom (zejména za současného působení obou vlivů) nastává polykondenzace jednotlivých typů sloučenin [2], což je dalším důvodem, proč je věnována pozornost studiu transformačních procesů při temperaci dehtárenských produktů.

Práce vychází z předchozích zkušeností [3] s řízenou termolýzou uhlovodíků. Jejím cílem je studium procesů při temperaci vybraných dehtárenských produktů - konkrétně směsí anthracenu s karbazolem, dibenzo/b,d/thiofenem a dibenzo/b,d/furanem v poměru 1:1 podle molekulové hmotnosti. Vzorky byly podrobeny tepelné expozici nad teplotou varu modelových směsí, při teplotě 390, 420, 450 °C, časová prodleva: 6, 24, 72 hodin. Příspěvek sumarizuje experimentální data změn obsahu nerozpustných látek v toluenu a chinolinu. K posouzení termolytických dějů bylo dále využito stanovení mezofáze a jejího mikroskopického vyhodnocení. Kinetika oxidace mezofáze byla sledována metodou termogravimetrické analýzy.

[1] MARSH, H., RODRÍGUES-REINOSO, F. *Sciences of Carbon Materials*. Amsterdam: Elsevier Science Ltd., 2000.674 s. ISBN 84-7908-544-4.
[2] VYMĚTAL, J., DAVID, L., KOŘENEK, P. *Výroba anthracenu a naftalenu*. Valašské Meziříčí: DEZA a.s., 1997, 150 str.
[3] ŠUGÁRKOVÁ, V. *Řízená termolýza vybraných aromatických uhlovodíků*. Disertační práce. Ostrava: VŠB 2004.

2Po75

ČERVENÉ PEROWSKITOVÉ PIGMENTY PRO KERAMICKÝ PRŮMYSL

Jaroslav Hrabica, Petra Šulcová, Miroslav Trojan

Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice, Česká republika, E-mail: Hrabica@mailupce.cz

Jednou z alternativ ve vývoji nových, červených a ekologicky nezávadných pigmentů může být použití sloučenin se strukturou perowskitu obecného vzorce ABO_3 [1]. Tato struktura je odvozena od přírodního minerálu perowskitu $CaTiO_3$. Bylo zjištěno, že oxid hlinitý tvoří s oxidem neodymu a yttria pevné roztoky s perowskitovou strukturou ($NdAlO_3$ a $YAlO_3$).

Pouhou částečnou náhradou Al^{3+} kationtem Cr^{3+} ve struktuře korundu vzniká zbarvení zelené. Pro dosažení červených odstínů je nutná přítomnost lanthanoidu, který zajišťuje vznik perowskitové struktury. Zamezení vzniku toxického Cr^{6+} zajišťuje vysoká teplota syntézy (1350-1500 °C). Novější studie ukázala, že pro daný systém lze použít různé oxidy lanthanoidů, nikoli pouze yttrium a neodym.

Pro syntézu perowskitových pigmentů byl použit jak jednostupňový způsob syntézy v tuhé fázi, tak i dvoustupňový suspenzní SMS způsob. Jako suroviny pro syntézu byly použity oxidy: Nd_2O_3, Y_2O_3, Gd_2O_3, La_2O_3, Er_2O_3, Eu_2O_3, Sm_2O_3, Tb_2O_3, Dy_2O_3 a Ho_2O_3. Byla připravena pigmentová řada s obecným složením $Ln_{0,8}Nd_{0,2}Cr_{0,05}Al_{0,95}O_3$ a zjišťován vliv jednotlivých lanthanoidů na barevné vlastnosti vzniklých pigmentů. Velký vliv na celkový barevný odstín má zvolený mineralizační systém. Nejsytějších červených odstínů je dosaženo pomocí systému NaF-Li_2CO_3-MgF_2. Možnost aplikace perowskitových pigmentů je především v oblasti keramických glazur a keramiky. Podle množství dávkovaného pigmentu vznikají růžové nebo slabě červené pleťové odstíny [2].

Barevné vlastnosti těchto pigmentů po aplikaci do keramických glazur byly změřeny ve viditelné oblasti spektra za použití přístroje MiniScan MS/S (HunterLab, USA) a k jejich vyhodnocení byl použit barevný prostor CIE L*a*b* [3].

[1] Y. Marinova, J. M. Hohemberger, E. Cordoncillo, P. Escribano, J. B. Carda: *J. Eur. Ceram. Soc.* 23, 213-220 (2003).
[2] Grantový projekt č. 104/05/2081, Grantová agentura ČR.
[3] P. Šulcová: Vlastnosti anorganických pigmentů a metody jejich hodnocení, Univerzita Pardubice, 2000.

2Po76

PŘÍPRAVA SLOUČENIN TYPU $Al_{2-(x+y)}La_xM_yO_3$

Michal Tůma, Petra Šulcová, Miroslav Trojan

Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice, Česká republika;
e-mail: Michal.Tuma@upce.cz

Cílem této práce bylo posoudit možnost použití sloučenin s obsahem prvku přechodného kovu typu $Al_{2-(x+y)}La_xM_yO_3$, kde x = 0,2; 0,5 a 0,7 (x+y=1) a M = Fe, Ni, Cu, Co, Cr a V, jako chemicky odolné, termicky stabilní a zároveň ekologicky nezávadné pigmenty použitelné pro vybarvování nejen nátěrových hmot, ale také pro vysokoteplotní aplikace v glazurách a smaltech [1].

Pigmenty byly připraveny klasickým suchým způsobem, který spočívá v homogenizaci výchozích surovin v třecí misce tloučkem a následné kalcinaci v elektrické peci při teplotě 1400 °C. Barevné vlastnosti takto připravených pigmentů byly měřeny pomocí spektrofotometru MiniScan MS/S (HunterLab, USA) v systému barevných souřadnic CIE L*a*b* [2] v oblasti viditelného světla (400 - 700 nm). Sytost S byla vypočítána podle: $S = [(a^*)^2 + (b^*)^2]^{1/2}$.

Nejlepších barevných vlastností bylo dosaženo pro pigmenty s obsahem Fe. Jejich barva přechází s poklesem obsahu Fe z červené na žlutooranžovou. Pigmenty obsahující Mn jsou černošedé až černé podobně jako pigmenty s obsahem Cu. Pigmenty s obsahem Cr přecházejí s poklesem jeho množství ze zelené na světle hnědou, stejně jako pigmenty obsahující Ni a Co. Pigmenty s obsahem vanadu ve formě V^{3+} jsou téměř bílé, pigmenty obsahující vanad ve formě V^{5+} se zvyšujícím se množstvím vanadu přechází z bílé na tmavý odstín hnědožluté barvy a při nejvyšším obsahu vanadu V^{5+} v pigmentu (x = 0,8) dochází za teploty 1400 °C k jeho úplnému spečení.

[1] Grantový projekt č. 104/04/1078 a 104/05/2081. Grantová agentura ČR.
[2] Šulcová P.: Vlastnosti anorganických pigmentů a metody jejich hodnocení, skriptum, Univerzita Pardubice, 2000

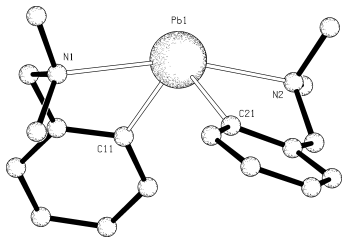
2Po77

STUDIUM STRUKTURY A VLASTNOSTÍ KOMPLEXNÍ A ORGANOKOVOVÉ SLOUČENINY Pb(II)

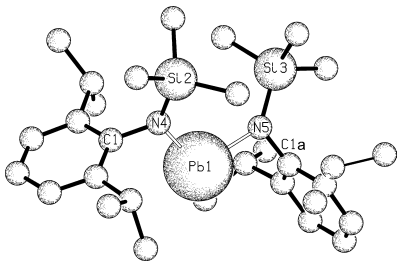
Vítězslav Šourek, Josef Bareš, Aleš Růžička

Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. Legií 565, 532 10 Pardubice, e-mail: VitanS@seznam.cz.

Komplexní či organokovové sloučeniny obsahují dva a více atomů kovu (často i více kovů v různých oxidačních stavech) jsou v současné době hojně studovány jak z hlediska jejich potenciálního využití v praxi (katalýza, mikroelektrotechnika, optika), tak i z čistě teoretických důvodů. Tématem tohoto sdělení je syntéza a studium struktury a reaktivity komplexních (obr. 1b) a organokovových (obr. 1a) [1] sloučenin olova v oxidačním stavu +II. Produkty reaktivity těchto sloučenin byly identifikovány pomocí NMR a XRD technik v roztocích a tuhé fázi. [1]



obr.1a



obr.1b

Autoři si dovolují poděkovat GA ČR (203/02/D169) a Univerzitě Pardubice FG 350022/2005.

[1] De Wit P, van der Kooi HO, Wolters J. *J. Organomet. Chem. 216*, C9 (1981).

2Po78

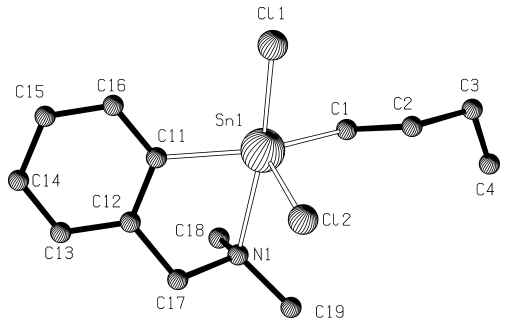
STUDIUM ORGANOCÍNIČITÝCH SLOUČENIN OBSAHUJÍCÍCH C,N-CHELÁTUJÍCÍ LIGAND JAKO FLUORAČNÍCH ČINIDEL PRO FLUORACE CHLOROSILANŮ

Petr Švec, Milan Nádvorník, Petr Novák, Aleš Růžička

Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. Legií 565, 532 10 Pardubice, e-mail: gty@post.cz

Struktura organocíničitých fluoridů obsahujících *C,N*-chelátující ligand(y), v roztocích i tuhé fázi, je na našem pracovišti intenzivně studována již tři roky s důrazem na jejich monomerní uspořádání nesoucí řadu výhod, hlavně při jejich využití jako velmi účinných fluoračních činidel, např. při fluoracích organokovových a organických substrátů[1]. Tématem tohoto sdělení je studium reaktivity připravených organocíničitých fluoridů při reakcích s různými organochlorosilany. Existuje mnoho metod pro konverze chlorosilanů na fluorosilany, které dávají dobrý výtěžek. Tyto metody ale mají mnohé nevýhody, jako vysokou cenu nebo toxicitu užitých činidel, nutnost užít více než ekvimolárního množství činidla, vyžadují poměrně tvrdé reakční podmínky a pro dosažení dobrých výtěžků je třeba velmi dlouhá reakční doba (až 14 dní)[2,3].

V příspěvku bude diskutována struktura výchozích organocíničitých chloridů, produktů reakcí a dále výhody plynoucí z využití námi připravených organocíničitých fluoridů při fluoracích chlorosilanů. Identifikace těchto sloučenin byla provedena pomocí NMR a XRD, výtěžnost a průběh reakcí vedoucích k požadovaným fluorosilanům byla sledována pomocí ^{19}F, ^{29}Si a ^{119}Sn NMR spektroskopie.



Obr. 1: Molekulová struktura výchozí organocíničité sloučeniny.

Autoři si dovolují poděkovat Grantové Agentuře ČR (203/04/0223) a MŠMT ČR (VZ 0021627501) za poskytnutou finanční podporu.

[1] P. Novák, J. Brus, I. Císařová, A. Růžička, J. Holeček. *J. Fluor. Chem.* odesláno do redakce .
[2] R. Damrauer, R. A. Simon, B. Kanner, *Organometallics, 7*, 1161-1164, (1988).
[3] P. D. Lickiss, R. Lucas, *J. Organomet. Chem., 510,* 167-172 (1996).

2Po79

VLIV MĚŘÍCÍCH TECHNIK A VELIKOSTI ČÁSTIC NA CHARAKTER INFRAČERVENÝCH SPEKTER JÍLOVÝCH MINERÁLŮ

Lenka Vaculíková, Eva Plevová

ÚGN AVČR, Studentská 1768, Ostrava - Poruba, 708 00, vaculikova@ugn.cas.cz

Předložený příspěvek hodnotí vliv základních technik FTIR spektroskopie používaných pro naměření spekter ve střední oblasti infračerveného záření na charakter spekter jílových minerálů montmorillonitu a kaolinitu. Výběr vhodné metody je důležitý, ať už se jedná o transmisní nebo reflexní techniku, každá z nich má svá specifika, přičemž polohy absorpčních pásů a jejich intenzity jsou do jisté míry ovlivněny právě zvolenou metodou [1]. Vliv měřících technik byl posuzován na montmorillonitu Jelšový potok (Slovensko) a kaolinitu Sedlec (Česká republika). Pro analýzu FTIR spektroskopií byly použity frakce pod 5 mm, které byly připraveny sedimentační metodou z přírodních vzorků vybraných jílových minerálů. Spektra byla naměřena jak klasickými transmisními technikami (KBr tableta, nujolová suspenze), tak pomocí méně běžných reflexních technik (ATR - attenuated total reflection, DRIFT - diffuse reflectance infrared Fourie transform).

Na uvedených jílových minerálech byl dále ověřován vliv velikosti částic potažmo vliv mletí na charakter infračervených spekter. Mikronové frakce jílových minerálů byly připraveny opět sedimentační metodou. Mechanická úprava vzorků byla provedena mletím ve vodní suspenzi v kulovém planetovém mlýnu při různých dobách mletí (od 30 min do 8 hod.). Protože mletí může v určitých případech způsobovat změny v krystalinitě a struktuře jílového minerálu, předpokládalo se, že se tyto změny projeví také v infračervených spektrech sledovaných minerálů [2], [3]. Proces mletí však výrazně neovlivnil charakter částic montmorillonitu ani kaolinitu a nezpůsobil významné změny ani v intenzitách jednotlivých absorpčních pásů v infračervených spektrech. Podobný trend byl potvrzen také termální analýzou.

[1] Madejová, J. Charakterizácia prírodných a chemicky modifikovaných ílových minerálov pomocou infračervenej spektroskopie, disertační práce, str. 16-18, (2004).
[2] Farmer, V.C. The Infrared Spectra of Minerals, pp. 12-23, (1974).
[3] Mingelgrin, L., Kliger, M., Gal, M. Saltzman, *S. Clays and Clay minerals,* Vol. 26, No. 4, pp. 299-307, (1978).

2Po80

REAKCE $(NPF_2)_3$ V KAPACITNĚ VÁZANÉM PLAZMATU

Zbyněk Voráč, Milan Alberti, Petr Urbančík, Jan Janča

Laboratoř fyziky plazmatu a plazmových zdrojů, Kotlářská 2, 611 37 Brno, zbynda@chemi.muni.cz

Zahříváním halogeno-cyklo-fosfazenů na teploty 150 - 320 °C po dobu desítek hodin vznikají vysokomolekulární polymery. Nukleofilními substitucemi atomů halogenů organickými substituenty byla připravena řada polymerů s rozličnými vlastnostmi (elasticita v širokém teplotním rozmezí, nehořlavost, vysoký index lomu). Značné energetické nároky polymerizací vedly ke snahám o jejich katalýzu. Kromě chemických katalyzátorů byly využity i fyzikální postupy. Nejlepších výsledků dosáhl Osada a kol. iniciací termické polymerizace $(NPCl_2)_3$ pomocí kapacitně vázaného plazmatu [1]. Postup dále rozpracoval Klein [2].

V naší studii jsme se zabývali polymerizací $(NPF_2)_3$ v kapacitně vázaném plazmatu. Fluorofosfazeny termicky polymerují při vyšších teplotách než chlorovaná analoga [3], avšak mají nižší body tání a vysoké tenze par, což umožňuje jejich snadné dávkování. V případě $(NPF_2)_3$ bylo významné zjištění, že doutnavý výboj bylo možné zapálit v jeho parách, bez přítomnosti inertního plynu. Vzniklé polymerní povlaky na stěnách reaktoru byly homogenní a transparentní, vizuelně pozorovatelné teprve po přidání organického rozpouštědla, nebo po částečné hydrolýze vzdušnou vlhkostí. Deponované polymerní vrstvy jsou nerozpustné v organických rozpouštědlech. Výhodné pro jejich analýzu je použití LDI-TOF MS. Naměřená hmotnostní spektra

obsahují homologickou řadu signálů, lišících se o skupinu NPF_2.

Tato práce vznikla za podpory projektu MSM 00 216 224 11

[1] Osada Y., Hashidzume M., Tsuchida E., Bell A. T., *Nature, 286*, 693-694 (1980)
[2] Klein J. A., *PhD. Thesis*, Department of Chemical Engineering, University of California, Berkeley, 1984
[3] Allcock H. R., Patterson D. B., Evans T. L., *Macromolecules, 12,* 172 (1979)

2Po81

PŘÍPRAVA NOVÝCH DERIVÁTŮ FOSFAZENŮ - REAKCE DIAMIDOTETRACHLORO-CYKLO-TRIFOSFAZENU S AMINODERIVÁTY ADAMANTANU

Radka Voznicová[a], Lenka Rakovická, Pavlína Vidláková, Milan Alberti[b], Jiří Příhoda[a]

[a] Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity v Brně, Kotlářská 2, 611 37 Brno, Česká republika
[b] Laboratoř fyziky, plazmatu a plazmových zdrojů, Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity v Brně, Kotlářská 2, 611 37 Brno, Česká republika
e-mail: voznic@post.cz

Tato práce navazuje na studium reakcí hexachloro-*cyklo*-trifosfazenu s amantadinem [1]. Reakce hexachloro-*cyklo*-trifosfazenu ($P_3N_3C_{l6}$) s primárními a sekundárními aminy jsou jedny z nejčastěji studovaných reakcí v chemii halogeno-*cyklo*-trifosfazenů [2,3]. Analogickým reakcím diamidotetrachloro-*cyklo*-trifosfazenu ($P_3N_3C_{l4}(NH_2)_2$) však nebyla věnována velká pozornost.

Námi studované reakce $P_3N_3C_{l4}(NH_2)_2$ s amantadinem, resp. memantinem vedou v závislosti na zvoleném molárním poměru výchozích látek ke vzniku dvou substitučních derivátů. Jedná se o tetrasubstituovaný derivát *gem*-$P_3N_3C_{l2}(NH_2)_2(NH\text{-}Ad)_2$, resp. *gem*-$P_3N_3C_{l2}(NH_2)_2(Mem)_2$ a také o plně substituovaný derivát $P_3N_3(NH_2)_2(NH\text{-}Ad)_4$. K identifikaci vznikajících produktů jsme využili především ^{31}P NMR spektroskopii.

Gem-$P_3N_3C_{l2}(NH_2)_2(NH\text{-}Ad)_2$ a *gem*-$P_3N_3C_{l2}(NH_2)_2(Mem)_2$ poskytovaly v ^{31}P NMR spektru signály charakteristické pro tři neekvivalentní atomy fosforu v molekule [tři dublety dubletů s chemickými posuny okolo 21,5 ppm pro PCl_2, 11,8 ppm pro $P(NH_2)_2$ a 4,7 pro $P(NH\text{-}Ad)_2$]. V ^{31}P NMR spektru plně substituovaného derivátu $P_3N_3(NH_2)_2(NH\text{-}Ad)_4$ byly přítomny multiplety typické pro AB_2 spinový systém [dublet s chemickým posunem δ = 6,9 ppm pro $P(NH\text{-}Ad)_2$ a triplet s chemickým posunem δ = 13,5 ppm pro $P(NH_2)_2$].

[1] Voznicová R., Taraba J., Příhoda J., Alberti M.: *Chem. Listy, 98*, 634 (2004)
[2] Allcock H. R.: „Recent Advanced in Phosphazenes (Phosphonitrilic) Chemistry“ in *Chem. Rev., Vol. 72*, No. 4, 315 (1972)
[3] Allen C. W.: „Regio- and Stereochemical Control in Substitution Reactions of Cyclophosphazenes“ in *Chem. Rev., Vol. 91*, No. 2, 119 (1991)

2Po82

PIGMENTY TYPU $Bi_{1,3-x}Y_xZr_{0,525}O_3$

Jitka Voženílková, Petra Šulcová

Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice, ČR, e-mail: Jitka.Vozenilkova@upce.cz

Podstatou pigmentů typu $Bi_{1,3-x}Y_xZr_{0,525}O_3$ je kubická mřížka δ-Bi_2O_3. Tyto pigmenty lze zařadit mezi barevné pigmenty, jenž mohou být použity k vybarvování keramických glazur, organických pojivových systémů a plastů a neobsahují ekologicky problematické prvky. Byly připraveny pigmenty $Bi_{1,3-x}Y_xZr_{0,525}O_3$, kde x = 0,1; 0,2; 0,3; 0,4 a 0,5. Pigmenty byly připraveny suchým způsobem přípravy. Jedná se o klasický způsob přípravy pigmentů, kdy navážky výchozích surovin - většinou oxidů - jsou vypočítány podle stechiometrických rovnic. Pro teploty výpalu pigmentů byl zvolen teplotní interval 750 - 850 °C. Připravené pigmenty byly aplikovány do transparentní olovnaté glazury G 028 91 (Glazura, s.r.o., Roudnice nad Labem, ČR). Celkové množství přidaného pigmentu odpovídalo 20 hmot. % na 2 g směsi. Pigmenty byly rovněž aplikovány do organického pojivového systému a to jak v plném tónu, tak v ředěném tónu ve hmotnostním poměru 1:1 s TiO_2. Měření barevných vlastností pigmentů bylo provedeno pomocí spektrofotometru MiniScan MS/S (HunterLab, USA).

Tato práce vznikla s podporou GAČR č. 104/04/1078 a MŠMT č. 0021627501.

2Po83

PŘÍPRAVA 3,3,4,4-TETRAMETHYLSUKCINIMIDODERIVÁTŮ FENYLCHLORFOSFANŮ A FENYLCHLORFOSFORANŮ

Martin Vyšvařil,[a] Dalibor Dastych*[a]

[a]Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Kotlářská 2, CZ-611 37 Brno, dastych@chemi.muni.cz

Vazba P-N je v chemii jednou z nejzajímavějších a mnoho z jejích aspektů stále uniká podrobnému vysvětlení. Do této ne zcela jasné oblasti anorganické chemie chceme přispět přípravou nových sloučenin, ve kterých je fosfor vázán na atom dusíku sukcinimidového cyklu. Jako výchozí látky, které obsahují 3,3,4,4-tetramethylsukcinimidový kruh, byly pro studované reakce použity 3,3,4,4-tetramethylsukcinimid

(TH)[1] a jeho draselná a sodná sůl (KT a NaT). Takto substituovaný derivát se vyznačuje zvýšenou stabilitou sukcinimidového kruhu. Methylové skupiny zabraňují nežádoucím reakcím na kruhu (vznik násobných vazeb, halogenace kruhu) nebo dokonce jeho rozevření. Na základě z literatury známých reakcí fenylchlorfosfanů a fenylchlorfosforanů s imidy[2] a se sekundárními aminy[3] byly provedeny reakce výchozích látek s $PhPCl_2$, Ph_2PCl, $PhPCl_4$, Ph_2PCl_3 a Ph_3PCl_2.

Reakcemi s vhodným molárním poměrem reaktantů jsme připravili a izolovali nové sloučeniny fenylbis(3,3,4,4-tetramethylsukcinimido)fosfan ($PhPT_2$), difenyl-3,3,4,4-tetramethyl-sukcinimidofosfan (Ph_2PT) a fenylbis(3,3,4,4-tetramethylsukcinimidát) fosforylu ($PhPOT_2$). Při reakcích fenylchlorfosforanů s TH nebo KT došlo vždy k tvorbě fosforylové vazby, proto se v těchto případech nepodařilo substituovat všechny atomy chloru. Reakcí Ph_3PCl_2 s TH v molárním poměru 1 : 2 vznikl trifenylfosfinoxid - 3,3,4,4-tetramethylsukcinimid.(Ph_3PO.TH).

K identifikaci a charakterizaci reakčních směsí a produktů byly použity fyzikálně chemické metody, především NMR spektroskopie, hmotnostní spektrometrie a RTG strukturní analýza.

[1] Eberson L., Lepistö M., Finkelstein M., Shirley A. H., Moore W. M., Ross S. D., *Acta Chem. Scan., Ser.B, 42*, 666-684, (1988)
[2] Raj P., Ranjan A., *Indian J. Chem., 22 A*, 120, (1982)
[3] Sisler H. H., Smith N. L., *J. Org. Chem., 26*, 611, (1961)

2Po84

REASERCHING OF AN OPTIMUM METHOD OF SYNTHESIS MONOCRYSTALS OF GALIUM NITRIDE (GaN)

Sławomir Podsiadło[b], Michał Kamiński[b], Piotr Wieczorek[a], Paweł Żuk[a]

[a] - Chemical Scientific Society FLOGISTON, Faculty of Chemistry Warsaw University of Technology, Noakowskiego 3, 00-664 Warsaw, POLAND
[b] - Institute ofInorganic Chemistry Faculty of Chemistry Warsaw University of Technology, Noakowskiego 3, 00-664 Warsaw, POLAND
http://flogiston.ch.pw.edu.pl; pwieczorek1@o2.pl

In our project we are trying to compare 2 methods of synthesis monocrystals of Galium Nitride.

First method is based on synthesis monocristals from powdered GaN which is a product of synthesis:
$Ga + NH_3 \rightarrow GaN + 3/2\ H_2$

Which proceeds in vapour phase in 1200°C with subsequent renitrification in 1000°C

The second method is based on synthesis monocrystals from more complicated salts, like, for example $KGaN_4$.

The biggest problem in those monocrystals is that we need to have very pure nitride, because if there is some galium inside cristal, it migrates to the centre of monocrystal, groups in a bigger structure and causes internal explosion.. The second method may be better, because we do not need to formulate galium nitide from elementary substrates. In our project we are trying to compare those two methods and choose this, which allows to receive bigger monocrystals.

2Po85

FOTOKATALYTICKÉ A ELEKTROCHEMICKÉ VLASTNOSTI VRSTEV OXIDU TITANIČITÉHO

Martin Zlámal, Josef Krýsa

Ústav anorganické technologie, VŠCHT Praha, Technická 5, 16628 Praha 6,
e-mail:martin.zlamal@seznam.cz

Práce se zabývá přípravou vrstev tvořených oxidem titaničitým na vodivých podkladech, studiem jejich fotokatalytických a elektrochemických vlastností. Byly připraveny 2 typy vrstev. Metodou elektroforézy z methanolové suspenze práškového fotokatalyzátoru P25 byly na skle s vodivou vrstvou připraveny vrstvy tvořené částicemi TiO_2. Jako další metoda byla zvolena tepelná oxidace titanu. Fotoaktivita připravených vrstev byla stanovena pomocí fotokatalytické degradace modelového azobarviva Oranž II. Dále byly měřeny potenciály otevřeného obvodu (E_{oc}) a polarizační křivky ozařovaných vrstev.

U částicových vrstev byla sledována závislost naneseného množství fotokatalyzátoru na době elektroforézy a rychlost fotokatalytické degradace v závislosti na vypočtené tloušťce vrstvy. Ukázalo se, že dobou elektroforézy lze řídit množství naneseného fotokatalyzátoru. Fotoaktivita roste s tloušťkou vrstvy, což je způsobeno zvyšujícím se podílem absorbovaného světla. Jako optimální se jeví vrstva, která absorbuje cca 95-100 % dopadajícího světla. Z tepelných TiO_2 vrstev vykazuje nejvyšší aktivitu vrstva vzniklá při teplotě 650 ° (30 min.) i když tato fotoaktivita je o 2 řády nižší než u částicových vrstev. Důvodem nízké fotoaktivity je to, že vrstva vzniklá tepelnou oxidací titanu je neporézní a má rutilovou krystalovou strukturu. Na druhé straně vrstva elektroforeticky naneseného fotokatalyzátoru P25 je porézní, což znamená, že pro fotokatalytickou oxidaci Oranže II se uplatňuje vyšší povrch.

U všech vrstev byly měřeny hodnoty E_{oc} a fotoproudů. Na rozdíl od fotoaktivity, fotoproudy vrstev tepelně oxidovaného titanu jsou vyšší než pro vrstvy tvořené částicemi P25. Nízké hodnoty fotoproudů pro vrstvy tvořené částicemi fotokatalyzátoru P25 jsou dány tím, že jednotlivé částice nemají dobrý kontakt a vrstva jako celek má vysoký odpor.

Tento příspěvek byl vypracován za finanční podpory MŠMT ČR (projekt č. 1M0577).

2Po86

REAKCE HALOGENIDŮ FOSFORITÝCH S N-DONOROVÝMI LEWISOVÝMI BAZEMI

Pavel Žák, Jan Taraba, Miloš Černík

Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity v Brně, Kotlářská 2, 611 37 Brno, cernik@chemi.muni.cz

Halogenidy fosforité lze z hlediska jejich reaktivity považovat za Lewisovy amfolyty. Prostřednictvím volného elektronového páru mohou tvořit donor-akceptorové komplexy s Lewisovými kyselinami, např. $X_3P \rightarrow BH_3$, zatímco vůči silným donorům (D) se chovají jako akceptory a vytvářejí adukty typu $D \rightarrow PX_3$. Literární údaje o vzniku a konstituci takovýchto aduktů s N-donorovými bazemi však jsou neúplné a zčásti rozporné. Při reakcích PX_3 (X = Cl,Br,I) se 4-dimethylaminopyridinem (DMAP) údajně dochází k heterolytickému štěpení všech vazeb P-X za vzniku $[(DMAP)_3P][X]_3$ [1], kdežto rentgenografické studium aduktů PBr_3 s NMe_3 a 1,4-dimethylpiperazinem [2] prokázalo jejich molekulární, trigonálně bipyramidální strukturu s rozpětím délky donor-akceptorové vazby $N \rightarrow P$ 1,978 až 2,802 Å .

Z uvedených důvodů jsme studovali reakce pyridinu a DMAP s PF_3, PCl_3 a PBr_3. Zatímco s PF_3 nereaguje žádná baze, PCl3 reaguje pouze s DMAP v molárním poměru 1:1 a struktura vzniklého aduktu $(DMAP)PCl_3$ představuje přechodný stav mezi pseudo-tbp konfigurací a iontovou formou s pseudotetraedrickým dichlorofosfeniovým kationtem, $[(DMAP)PCl_2]^+Cl^-$.

Bromid fosforitý poskytuje s pyridinem i DMAP adukty 1:1, při použití nadbytku DMAP však dochází k odštěpení dalšího aniontu Br^- a vzniku $[(DMAP)_2PBr][Br]_2$. Sůl s obdobným, donory stabilizovaným kationtem $[(DMAP)_2PCl]^{2+}$ se podařilo připravit reakcí

$$2\,[(DMAP)SiMe_3][CF_3SO_3] + PCl_3 \rightleftharpoons [(DMAP)_2PCl][CF_3SO_3]_2 + 2\,Me_3SiCl$$

Oba kationty mají pseudotetraedrickou konfiguraci s relativně krátkými (1,763 - 1,791 Å) vazbami $N \rightarrow P$.

[1] Weiss R., Engel S., *Synthesis*,1991, 1077
[2] Müller G., Brand J., Jetter S.E., Z. *Naturforsch., 56b*, 1163, (2001)

2Po87

PUZZOLANIC ACTIVITY OF SECONDARY RAW MATERIALS

František Šoukal[a], Jaromír Havlica[b]

[a]*Department of Materials Engineering, Faculty of Chemistry, BUT, Purkyňova 118, 612 00 Brno, Czech Republic, e-mail: soukal@fch.vutbr.cz*
[b]*Department of Materials Engineering, Faculty of Chemistry, BUT, Purkyňova 118, 612 00 Brno, Czech Republic, e-mail: havlica@fch.vutbr.cz*

During the cement and water reaction, the clinker minerals are hydrated to create hydration product. The reactions are accompanied by heat evolution in several stages. Some materials may be added to the cement in a certain amount without decreasing of the final material properties despite of they don't create a binder alone. This material property is known as puzzolanic activity. The reactions course in the cement-water system must be logically joined with the thermal effect. To enable measurement of the heat evolved by puzzolanic reactions, they have to be subjected to a calorimetric study. If compared the cement-water reaction heat with the heat evolved from the same mixture with addition of a puzzolan, there may be an ability to determine the amount of heat belonging to puzzolanic reactions. It is necessary to use abundance of water to eliminate mixture dilution by puzzolan addition. Also there is a need to choose the appropriate amount of the puzzolan. There were measured about fifty samples of various mineral secondary raw materials coming mainly from Czech Republic and Slovakia. Measured thermokinetic curves and assembled histograms are associated with the paper.

3Po01

STUDIUM STRUKTURY PRODUKTŮ AZOKOPULACE 5-NITRO-2,1-BENZISOTHIAZOL-3-DIAZONIUM HYDROGENSULFÁTU S AROMATICKÝMI AMINY

Hana Bělohlavová[a], Josef Přikryl[a], Michal Černý[a], Vladimír Macháček[b], Antonín Lyčka[c]

[a] *Institute of Polymeric Materials, University of Pardubice, Nám.Cs. Legií 565, 53210 Pardubice, Czech Republic, E-mail:hana.belohlavova@upce.cz*
[b] *Department of Organic Chemistry, University of Pardubice, Nám.Cs. Legií 565, 53210 Pardubice, Czech Republic*
[c] *Research Institute for Organic Syntheses, 53218 Pardubice-Rybitví, Czech Republic*

Při přípravě azobarviva C. I. Disperse Blue 148 a i v jeho komerčních značkách byla prokázána přítomnost neznámé oranžové vedlejší látky. Zjistili jsme, že neznámou látkou je 1-(5-nitro-2,1-benzisothiazol-3-yl)-3-ethyl-3-fenyltriazen, který neočekávaně vzniká ve většinovém množství (očekávaný vznik barviva do jádra vzniká jen ve stopách), azokopulací 5-nitro-2,1-benzisothiazol-3-diazonium hydrogensulfátu s *N*-ethylanilinem viz schéma 1. *N*-Ethylanilin představuje obvyklou nečistotou v pasívní komponentě methyl-3-(*N*-ethyl-*N*-fenyl)aminopropanoátu (v důsledku neúplné konverze při adici *N*-ethylanilinu na methyl-propenoát). Vniklý triazen je nežádoucím produktem, neboť kalí odstín barviva a ze směsi je špatně odstranitelný.

Zjistili jsme, že podobně jako *N*-ethylanilin reagují s 5-nitro-2,1-benzisothiazol-3-diazonium hydrogensulfátem i další *N*-monosubstituované aniliny.

Přípravu a vlastnosti triazenů **1a** až **1f** ($R^1 = CH_3$, $R^2 = H$; $R^1 = C_2H_5$, $R^2 = H$; $R^1 = C_6H_5$, $R^2 = H$; $R^1 = {}_n\text{-}C_4H_9$, $R^2 = H$; $R^1 = {}_n\text{-}C_4H_9$, $R^2 = CH_3$; $R^1 = CH_2CH_2CN$, $R^2 = CH_3$; $R^1 = CH_2CH_2OH$, $R^2 = Cl$) jsme publikovali v našem předchozím sdělení [1]. Uvedené triazeny byly charakterizovány elementární analýzou, ^1H a ^{13}C NMR spektry a APCI hmotnostními spektry. Ve třech případech byly provedeny rentgenostrukturní analýzy: pro $R^1 = C_6H_5$, $R^2 = H$ a $R^1 = CH_2CH_2OH$, $R^2 = Cl$ [1] a pro $R^1 = {}_n\text{-}C_4H_9$, $R^2 = H$ [2].

Triazeny jsou brilantní oranžové látky s $\lambda_{max} \sim 460$ nm a $\varepsilon_{max} \sim 2.5.10^4$ $l.mol^{-1}cm^{-1}$. Jejich pozoruhodnou vlastností je neobvyklá stabilita v kyselém prostředí na rozdíl od dosud známých 1,3-diaryltriazenů, které se v kyselém prostředí rychle štěpí na diazoniový ion a amin [3-5]. Zjistili jsme, že 1-(5-nitro-2,1-benzisothiazol-3-yl)-3-ethyl-3-fenyltriazen se v 0.5 mol.l-1 H_2SO_4 ve vodné kyselině octové (1:1 v/v) při 25°C rozpadá na 5-nitro-2,1-benzisothiazol-3-diazonium s poločasem 1/2 417 min [1]. Důvod vysoké stability triazenů vysvětlujeme odlišným místem protonace těchto látek od 1,3-diaryltriazenů. Zatímco 1,3-diaryltriazeny se protonují na NH skupině triazenového seskupení předpokládáme, že triazeny se protonují na heterocyklickém dusíku [1]. Tento předpoklad nebylo možno experimentálně prokázat.

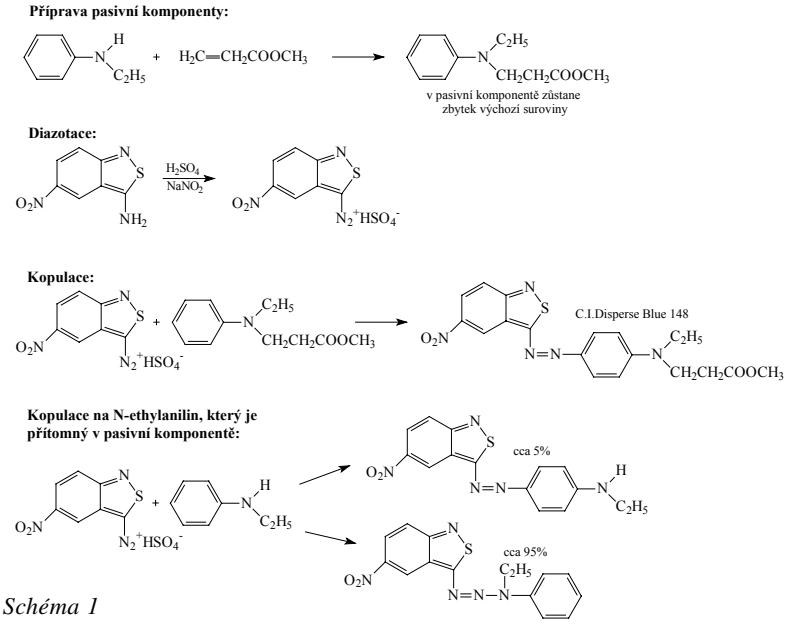


Schéma 1

[1] Přikryl J., Lyčka A., Bertolasi V., Holčapek M., Macháček V. *Eur J Org Chem*, 4413-4421, (2003)
[2] Kettmann V., Lokaj J., Kožíšek J., Přikryl J., Macháček V. *Acta Cryst C*, 60,143-145, (2004)
[3] Zollinger H. *Diazo Chemistry I, Aromatic and Heteroaromatic Compounds, Weinheim: Wiley VCH; Chapter 13.2*, 391-444, (1994)
[4] Saunders K.H., Allen R.M.L. *Aromatic Diazo Compounds, 3rd ed. London: Arnold,* (1985).
[5] Beneš J., Beránek V., Zimprich J, Vetešník P. *Collect Czech Chem Commun 4*, 702-710, (1977)

3Po02

SYNTÉZA DERIVÁTOV KYSELÍN 2-(2-OXO-2H-CHROMÉN-3-YL)OCTOVÝCH - PREKURZOROV NOVÝCH ANTINEOPLASTÍK

Silvia Kováčová[a], Margita Lácová[a], Štefan Štanga[a], Andrej Boháč[a], Marta Sališová[a], Gabriela Addová[b]

[a]*Katedra organickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, 842 15 Bratislava, E-mail:bohac@fns.uniba.sk*
[b]*Chemický ústav, Univerzita Komenského, 842 15 Bratislava*

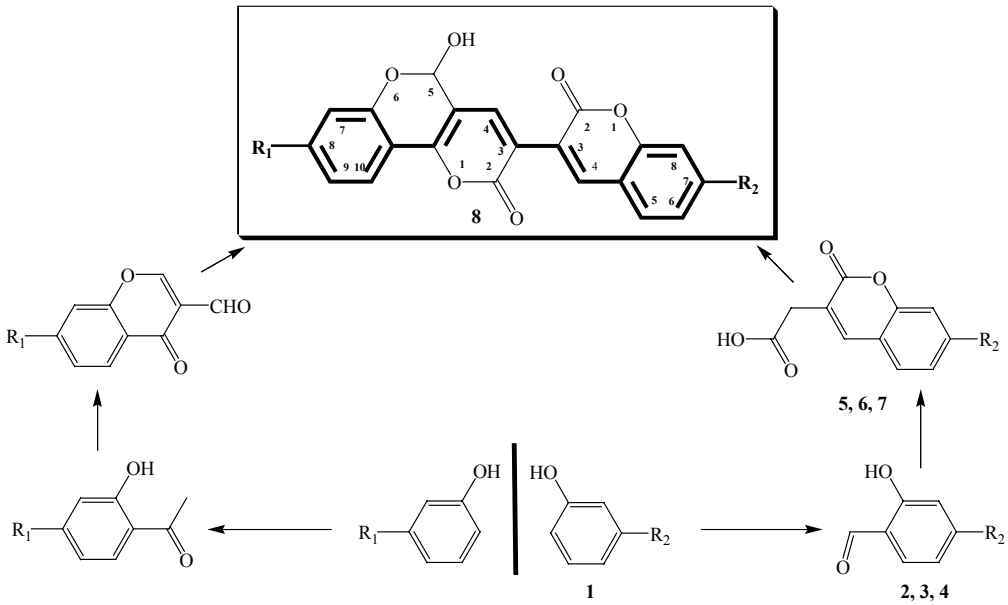
Výskyt úmrtnosti na onkologické ochorenia je hneď na 2. mieste za srdcovo-cievnymi chorobami. Porozumenie vzťahu medzi štruktúrou a biologickou aktivitou umožňuje lepšie poznať mechanizmus pôsobenia nových liečiv.

Prostredníctvom biologických testov na onkologických bunkách v *National Cancer Institute* v USA bola nájdená nová aktívna nosná štruktúra (GI_{50} 10^{-6} až 10^{-8} mol/l). Tento skelet má dobre konjugovaný systém aromatických kruhov spojených systémom trojice dvojných väzieb. Z tohto hľadiska je možné skúmať koreláciu štruktúry s biologickou aktivitou modifikáciou elektrónovej distribúcie vhodne umiestnenými substituentami spôsobenú mechanizmom *„push - pull“*.

Na našom pracovisku sa uskutočňuje syntéza vhodných prekurzorov nových typov aktívnych antineoplastických zlúčenín **8**. (Schéma 1)

Vychádzali sme zo salicylaldehydu **2**, 2,4-dihydroxybenzaldehydu **3** a 2-hydroxy-4-metoxybenzaldehydu **4.** Podarilo sa nám cielene pripraviť kyselinu 2-(2-oxo-2H-chromén-3-yl)octovú **5**, ako aj jej dva elektrónovo bohaté deriváty 7-hydroxy **6** a 7-metoxy **7**. Syntézu spomenutých kyselín, ako aj ich východiskových látok **3, 4** sme uskutočnili z rezorcinolu **1**. Syntézy boli optimalizované na výťažok a čistnie produktov z reakčných zmesí. Pozorovali sme výrazné fluorescenčné vlastnosti kumaryloctových kyselín **5-7**, čo môže byť predmetom ich ďalšieho využitia napr. vo forme biologických fluorescenčných značiek, alebo v materiálovej chémii. Navrhli sme mechanizmus vzniku týchto látok. Pripravené kyseliny **5-7** sú prekurzormi nových antineoplastík na báze skeletu **8**. Biologická aktivita aduktov pripravených kyselín a tiež *Biskumarínov* bude skúmaná pomocou *in vitro* biologického skríningu v USA na onkologických bunečných paneloch.

Poďakovanie: Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu vedy a techniky na základe zmluvy č. APVT-20-031904.



$R_{1,2}$: Me_2N-,NH_2-, HO-, $(HO-)_2$, MeO-, AcO-, H-, indolyl-, F-, Cl-, Br-, NC-, CH_3CO-, F_3C-, OHC-, $(NO_2)HC{=}CH$-, $(CN)_2C{=}$, MeOOC-, O_2N-

Schéma 1: Syntéza nového nosného konjugovaného skeletu 8.

3Po03

DEGRADACE POLYESTERAMIDŮ NA BÁZI ε-KAPROLAKTAMU A ε-KAPROLAKTONU

Daniela Chromcová[a], Jiří Brožek[a], Jan Roda[a], Josef Náhlík[b], Václav Šašek[c]

[a]*Ústav polymerů*
[b]*Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, ČR, E-mail: Jiri.Brozek@vscht.cz*
[c]*Mikrobiologický ústav AV ČR, Vídeňská 1083, 142 20 Praha 4, ČR*

Řada polyesteramidů (PEA) - poly[(ε-kaprolaktam)-co-(ε-kaprolaktonů)] byla připravena aniontovou kopolymerací ε-kaprolaktonu a ε-kaprolaktamu iniciovanou ε-kaprolaktammagnesium bromidem. Získané materiály byly hodnoceny termickými vlastnostmi (T_m, H_m, T_g) z DSC a DMA. S obsahem laktonových jednotek klesala teplota tání, modul pružnosti v tahu, obsah krystalické fáze, rostla však houževnatost a tažnost.

Lisováním při teplotě 20°C nad teplotou tání materiálu byly připraveny folie pro hodnocení biologické rozložitelnosti. Folie byly též charakterizovány základními mechanickými vlastnostmi. Rozložitelnost PEA byla posouzena abiotickou hydrolýzou prováděnou ve fosfátovém pufru při 60°C v neutrálním, kyselém a zásaditém prostředí po dobu až 12 týdnů. Materiály byly též vystaveny účinku vybraných kmenů ligninolytických hub při 23°C. Hlavní pozornost byla soustředěna na kompostovací testy, které probíhaly po dobu 6 a 14 týdnů. Vzorky po provedených testech byly charakterizovány redukovanou viskozitou, úbytkem hmotnosti, termickými a mechanickými vlastnostmi a IR spektroskopií. U vybraných vzorků byla sledována změna povrchu pomocí SEM. Změny hodnocených vlastností vzorků před a po provedených testech indikují, že s obsahem hydrolyticky labilních jednotek (laktonových) zabudovaných do struktury polymerních řetězců se zvyšuje citlivost k (bio)degradaci.

Tato práce vznikla za podpory grantu č. 203/03/0508 Grantové agentury ČR.

3Po04

JEDNOZNAČNÁ SYNTÉZA N-FENYL-3-AMINOPYRAZOLŮ

Petr Cankař[a], Michal Maloň[b], Petr Barták[c], Jan Slouka[a]

[a] *Katedra organické chemie, c Katedra analytické chemie, Univerzita Palackého, Tř. Svobody 8, Olomouc 77146, Česká republika, E-mail: cankar@orgchem.upol.cz*
[b] *Laboratoř růstových regulátorů UP a AV ČR, Šlechtitelů 11, Olomouc 78371, Česká republika*

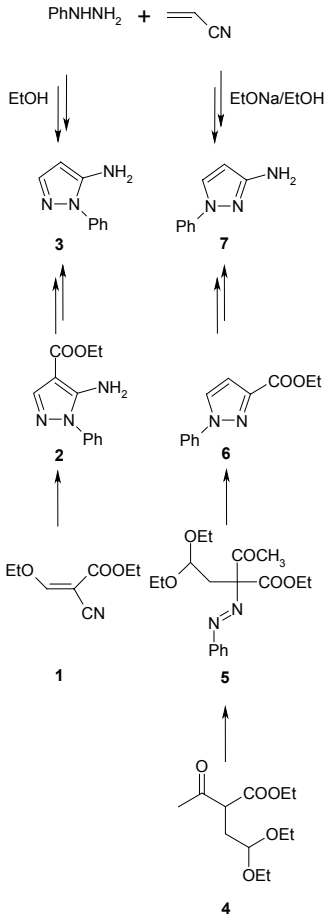
Dosavadní syntézy izomerních N-fenyl-3-aminopyrazolů, které jsou důležitými komponentami sulfonamidů a některých jejich léčiv, nejsou zcela jednoznačné. Jednou z metod je reakce fenylhydrazinu a akrylonitrilu, kde v závislosti na reakčních podmínkách dochází k adici na b uhlík akrylonitrilu či nitrilové skupiny. Bylo zjištěno, že tato metoda není spolehlivá z hlediska čistoty produktů. Zejména při přípravě derivátu **3** vzniká významné množství izomeru **7**. Aby bylo možné zhodnotit spolehlivost metod přípravy obou izomerů, bylo nutné připravit čisté sloučeniny jednoznačnými syntetickými postupy.

Pro izomer **3** byla vybrána již známá metoda publikovaná Schmidtem [1]. Tento postup vychází z esteru kyseliny ethoxymethylenkyanoctové **1**, který reakcí s fenylhydrazinem poskytuje derivát pyrazolu **2**. Následným převedením esterové skupiny na karboxyl a jeho dekarboxylací vzniká čistý izomer **3**.

U izomeru **7** jsme vypracovali syntetický postup vycházející ze sloučeniny substituovaného ketoesteru **4**, který byl připraven alkylací esteru kyseliny acetoctové bromacetalem. Kopulační reakcí benzendiazoniové soli a ketoesteru **4** vzniká azosloučenina **5**, která v kyselém prostředí podléhá štěpné cyklizační reakci za vzniku pyrazolu **6**. Po převedení na azid byl 1-fenyl-3-aminopyrazol **7** připraven Curtiuvým odbouráním [2].

Projekt byl podpořen výzkumným záměrem MSM6198959216 Ministerstva školství, mládeže a sportu České republiky.

[1] Schmidt P., Druey J. Helv. *Chim. Acta, 41*, 306-309, (1958)
[2] Duffin G.F., Kendall J. D. *J. Chem. Soc.*, 408-415, (1954)



3Po05

PECTIN AND HEMICELLULOSE POLYSACCHARIDES OF SAGE POSSESSING IMMUNOMODULATORY ACTIVITY

Peter Capek[1], Vera Hříbalová[2], Mária Matulová[1]

[1]Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, E-mail:chemcape@savba.sk
[2]National Institute of Public Health, Šrobárova 48, 100 42 Praha 10

Sage (*Salvia officinalis* L.) is a common medicinal plant cultivated in Slovakia with a large scale of bioactive compounds. This herbal plant is used in traditional medicine for treatment of a wide range of diseases. The ethanolic tincturres and decoctions have been long known for their curing effects in various inflammations of oral cavity, digestive and intestinal tracts. The aerial parts of sage are used as well for culinary purposes and antioxidant properties [1].

Crude polysaccharide fractions, rich in pectic arabinogalactans, pectin and glucuronoxylan-related polymers have been isolated by sequential extraction with distilled water, ammonium oxalate and 1M potassium hydroxide from the aerial parts of sage [2,3]. The crude polysaccharide fractions were purified by anion-exchange and gel chromatography. Water-extractable polysaccharides were rich in arabinose, galactose, 3-*0*-methylgalactose and glucose, while the acidic polysaccharides were consisted mainly of galacturonic acid along with rhamnose, arabinose and galactose indicating the pectin-type of polysaccharides with rhamnogalacturon type I (RG-I) backbone. Hemicellulose polysaccharides solubilized with 1M potassium hydroxide solution were rich mainly in xylose, whereas glucuronic acid, arabinose and galactose were present as minor components indicating the presence of arabinoglucuronoxylan or glucuronoxylan type of polymers. The isolated polysaccharides displayed a broad molecular-mass distribution patterns and were examined for immu-nomodulatory activity in the in vitro comitogenic thymocite test. The immunological activities of polysaccharides in correlation with their structural features are considered.

The work was supported by grants VEGA 2/3162/23 and APVT-2-017304.

[1] Lu Y., Foo L.Y. *Tetrahedron Letters*, 42, 8223-8225 (2001).
[2] Capek P., Hříbalová V., Švandová E., Ebringerová A., Sasinková V., Masarová J. *Int. J. Biol. Macromol. 33*, 113-119, (2003).
[3] Capek P., Hříbalová V. *Phytochemistry, 65*, 1983-1992, (2004).

3Po06

FLAVIN BASED OXIDATION CATALYSTS

Radek Cibulka, Baptiste Plancq, Lenka Marková

Department of Organic Chemistry, Institute of Chemical Technology, Prague, Technická 5, 166 28 Prague 6,E-mail: cibulkar@vscht.cz

Flavins represent an important group of natural compounds acting as versatile reducing or oxidizing „agents“ in many types of enzymes, e.g. in oxidases, reductases, monooxygenases or luciferases and photolyases[1,2]. This inspired many authors to utilize flavin derivatives in oxidation of various organic substrates: Bayer-Villiger oxidation of cyclobutanones or cyclopentanones, oxidation of amines and sulfides, photooxidation of benzylalcohols.

The aim of our study is preparation of nanoaggregates (micelles, microemulsions) containing amphiphilic flavin derivatives and investigation them as „artificial oxidases“, e.g. for oxidation of sulfides, photooxidation of alcohols. Such simple supramolecular systems could allow very efficient oxidation of various substrates under mild conditions (aqueous solutions, neutral pH, room temperature). Moreover faster and more selective reactions are expected in the above-mentioned aggregates compared to reactions performed in homogeneous solutions.

Finantial support for this work was provided by Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (Grant No 1K04105).

[1] Massey V.: *Biochem. Soc. Trans. 28*, 283 - 296, (2000).
[2] Palfey B.; Massey V.: *Flavin-Dependent Enzymes in Comprehensive Biological Catalysis* (Sinnott M., Ed.), Vol. 3, pp. 83 - 154, Academic Press, London 1998.

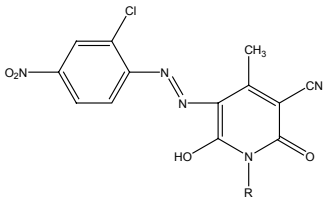
3Po07

HOMOLOGICKÁ SMĚSNÁ DISPERZNÍ BARVIVA PRO BARVENÍ POLYESTEROVÝCH VLÁKEN

M. Černý, J. Přikryl

Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Ústav polymerních materiálů, 532 10 Pardubice, E-mail: michal.cerny@upce.cz

V mé práci jsou diskutovány nejnovější výsledky koloristických i vytahovacích vlastností homologické skupiny disperzních azobarviv následujícího strukturního vzorce [1]:



R = H, methyl, ethyl, n-propyl, butyl, cyklohexyl, benzyl
Obrázek: Strukturní vzorec disperzních azobarviv

Použitím různých alkylů vázaných přes dusík na pyridonovém heterocyklu nedochází k ovlivnění absorpčního spektra barviva, tzn. že ve směsích nebude docházet k odstínovému posunu vůči odstínům jednotlivým složkám směsi barviv. Jednotlivá barviva tohoto typu nemají velkou afinitu k PES vláknu (max. 2,5 násobek [2] jedninové síly). Ale již kombinací 2 barviv lze dosáhnout vyšší síly vybarvení barviva, např. kombinace H-P, E-P a P-BU dosahují až pětinásobek jedninové síly. Rozšířením počtu barviv ve směsi na 3 se dosáhlo ještě lepších výsledků než u dvojsložkových směsí azobarviv, např. třísložková barviva H-M-BU, H-P-BU nebo E-P-BU dosahovala více jak šestinásobek jedninové síly.

Dalším kriteriem pro hodnocení disperzních barviv je jejich vytahovací schopnost charakterizována vytahovacími křivkami. Vytahovací křivky byly stanoveny pro vybarvení v 1/1 RT a v 4/1 RT. Jednotlivá disperzní azobarviva dosahovala předepsanou sílu vybarvení pomaleji. Disperzní směsná barviva naopak dosahovala výrazně strmější vytahovací křivku s rychlejším dosažením požadovaného vybarvení a to jak při vybarvení v 1/1RT tak i v 4/1RT. Dosahovali také většího vyčerpání barviva z lázně. Vyzdvihnout lze zvláště pak směsné disperzní barvivo H-M-BU, které dosahovalo velmi dobrých koloristických i vytahovacích vlastností.

Důvodem výrazně lepších koloristických i vytahovacích vlastností u směsných barviv založených na 2-chlor-4-nitroanilinu je synergický efekt jednotlivých složek, kdy se složky barviva při barvení polyesterové stříže navzájem neovlivňují. Důsledkem toho lze vhodnými kombinacemi jednotlivých složek barviv dosáhnout vyšších limitních saturačních hodnot směsného barviva. Zvýší se tím množství barviva difundovaného do polyesterového vlákna. Zvýší se i vyčerpání lázně a rychleji se dosáhne požadovaného vybarvení.

[1] DE 3246949, 1983.
[2] M. Černý, J. Přikryl.*Zpravodaj STCHK č. 4/2004 s. 40,* ISSN 1214-8091.

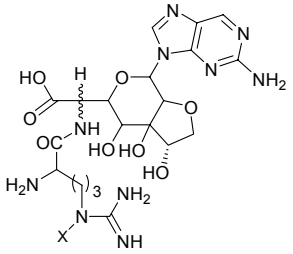
3Po08

STEREOSELECTIVE SYNTHESIS SUGAR MOIETY OF MIHARAMYCINS AND THEIR ANALOGUES VIA [3,3]-HETEROSIGMATROPIC REARRANGEMENTS

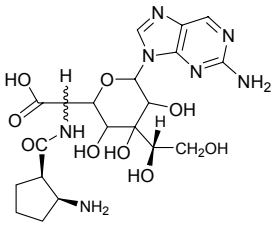
Patrik Čonka, Jozef Gonda

Department of Organic Chemistry, P. J. Šafarik University, Moyzesova 11, 041 67 Košice, Slovak Republic
E-mail: conkap@upjs.sk, jgonda@kosice.upjs.sk

Miharamycins ***I, II*** and Amipurimycin ***III*** are complex nucleoside antibiotics that act as potent inhibitors of *Pyricularia oryzae,* known to cause the rice blast disease [1,2]. Miharamicyns are produced by *Streptomyces miharaensis* SF-489. Amipurimycin was isolated from *Steptomyces novoguineneensis* nov. sp.[2] Syntheses generally start from a suitable protected and functionalized carbohydrate derivative. The key step involves diastereoselective introduction of the amino group at C-6 of the glucose by [3,3]-heterosigmatropic rearrangements of the corresponding allylic thiocyanates and trihalogenacetimidates.



I Miharamycin A : X= OH
II Miharamycin B : X= H



III Amipurimycin

[1] Tsuruoka T., Yumoto H., Ezaki N., Niida T. *Sci. Reports of Meiji Seika Kaisha 9*, 1 (1967), Rauter A., Ferreira M., Borges C., Duarte T., Piedade F., Silva M., Santos H. J. *Carbohydr. Res. 325*, 1 (2000).
[2] Iwasa T., Kishi T., Matsura K., Wakae O. *J. Antibiot., 30*, 1 (1977).

3Po09

PRÍPRAVA, FOTOCHEMICKÁ STABILITA A VYUŽITIE DVOJFUNKČNÝCH FLUORESCENČNÝCH ZNAČIEK BENZOTIOXANTÉN-HAS

Martin Danko, Štefan Chmela, Pavol Hrdlovič

Ústav polymérov, Centrum excelencie pre degradáciu biopolymérov CEDEBIPO, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava;
E-mail: upoldan@savba.sk;

Multifunkčné fluorescenčné značky obsahujúce v molekule rôzne štruktúrne jednotky a funkčné skupiny sa často využívajú na sledovanie priebehu rôznych fotochemických a fotofyzikálnych javov v rozličných prostrediach. Sledujú sa hlavne parametre značiek, ktoré vykazujú silnú závislosť na okolitom prostredí [1].

Problematike difunkčných fluorescenčných značiek sa v našom laboratóriu venujeme už dlhší čas. Jednou funkciou v značke predstavuje chromofór emitujúci fluorescenciu, druhou funkciou je stéricky tienený amín (HAS-hindered amine stabilizer) resp. stabilný N-oxid a alkoxyderivát.

V tejto práci sme použili benzotioxanténový chromofór viazaný s HAS cez imidický mostík. Skúmané značky 2-(4-(2,2,6,6-tetrametyl)piperidín)-tioxanténo[2,1,9-dej]izochinolín-1,3-dión (BTXI-NH), 2-(4-(1-oxo-2,2,6,6-tetrametyl)piperidín)-tioxanténo[2,1,9-dej]izochinolín-1,3-dión (BTXI-NO), 2-(4-(1(1'-fenyletyl)oxy-2,2,6,6-tetrametyl)piperidín)-tioxanténo[2,1,9-dej]izochinolín-1,3-dión (BTXI-NOR) a modelový derivát 2-oktadecyl-tioxanténo[2,1,9-dej]izochinolín-1,3-dión (BTXI-D). boli pripravené kondenzáciou príslušného anhydridu (BTXA) a 4-amino-2,2,6,6-tetrametylpiperidínu, piperidín-N-oxylu resp. oktadecylamínu. Príprava alkoxyamínu vychádzala z BTXI-NO derivátu a styrénu. Pri ožarovaní filmov polypropylénu (PP) s dopovanými derivátmi žiarením s vlnovou dĺžkou $\lambda > 310$ nm sa zistilo, že BTX skelet je stabilnejší ako všetky doteraz skúmané chromofóry [2]. Kinetika fotolýzy derivátov vo filme neprebieha za vzniku iných štruktúr, bol pozorovaný len postupný zánik ich absorpčného pásu, pričom chromofór bol prítomný v PP filme počas celej indukčnej periódy fotooxidácie PP. Dokázané intramolekulové zhášanie fluorescencie chromofóru na singletnej aj tripletnej úrovni paramagnetickým centrom v BTXI-NO deriváte v roztokoch a aj v polymérnych filmoch dovoľuje použitie tejto série derivátov na monitorovanie radikálových procesov prebiehajúcich pri fotooxidácii v polymérnych filmoch. Cieľom práce je sledovanie známeho cyklického mechanizmu stabilizácie PP HAS štruktúrami pomocou fluorescencie. „Zapnutá“ fluorescencia sa v BTXI-NH „zhasne“ v dôsledku oxidácie na BTXI-NO. Následnými reakciami radikálu s radikálmi vzniknutými na reťazcoch v dôsledku UV žiarenia vznikajú alkoxy štruktúry (BTXI-NOR), ktoré majú fluorescenciu opäť „zapnutú“. Z časových profilov intenzít fluorescencie, ktoré zachytávajú tento process je zrejmé, že oxidácia >NH na >NO derivát prebieha pomerne rýchlo, zatiaľ čo na ustálenie intenzity emisie pre >NO v dôsledku rovnovážnych reakcii >NO ↔ >NOR je potrebný dlhší časový interval.

Poďakovanie: Autori ďakujú grantovej agentúre VEGA za finančné krytie výskumu v rámci grantov číslo 2/3002/23 a 2/5108/25.

[1] A.P. DeSilva, H.Q.N. Gunaratne, T. Gunnlagsson, A.J.M. Huxly, C.P. McCoy, J.T. Rademacher, T.E. Rice: *Chem. Rev., 97,* 1515, (1997)
[2] M. Danko, Š. Chmela, P. Hrdlovič, *Polym. Deg. Stab.*, v tlači.
[3] P. Hrdlovič, Š. Chmela, M. Danko, M. Sarakha, Gh. Guyot, *J. Photochem. Photobiol. A. Chem.*, v tlači.

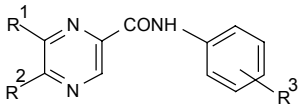
3Po10

AMIDY PYRAZINKARBOXYLOVÉ KYSELINY: SYNTÉZA, ANTIFUNGÁLNÍ HODNOCENÍ A JEJICH INHIBIČNÍ VLIV NA FOTOSYNTÉZU

Martin Doležal[a], Rudolf Bruner[a], Vladimír Buchta[b], Josef Jampílek[c], Katarína Kráľová[d]

[a]Katedra farmaceutické chemie a kontroly léčiv, [b]Katedra biologických a lékařských věd, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Univerzita Karlova v Praze, Heyrovského 1203, CZ-50005 Hradec Králové; [c]Zentiva a.s., U Kabelovny 130, CZ-10237 Praha; [d]Chemický ústav, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská Dolina, SK-84215 Bratislava; E-mail: martin.dolezal@faf.cuni.cz

Přírodní a syntetické deriváty pyrazinu představují velmi perspektivní skupinu potenciálních léčiv se širokým spektrem biologických účinků [1]. Naše pracoviště se vedle hledání nových antituberkulotik na bázi pyrazinu dlouhodobě zabývá i vývojem potenciálních pyrazinových antimykotik či studiem sloučenin pyrazinu s inhibiční aktivitou na fotosyntézu, které mohou mít praktické využití jako herbicidy [2,3]. Toto sdělení se zabývá syntézou a následným biologickým hodnocením série 32 substituovaných anilidů pyrazinkarboxylové kyseliny. Připravené sloučeniny byly zkoušeny in vitro na antimykotickou aktivitu pomocí mikrodiluční bujónové metody na aktivitu proti *Candida albicans* ATCC 44859, *C. tropicalis* 156, *C. krussei* E28, *C. glabrata* 20/I, *Trichosporon beigelii* 1188, *Trichophyton mentagrophytes* 445, *Aspergillus fumigatus* 231 a *Absidia corymbifera* 272. Hodnocení herbicidní aktivity zahrnovalo testování inhibice přenosu elektronů v chloroplastech špenátu (*Spinacia oleracea*) a testování redukce obsahu chlorofylu v *Chlorella vulgaris*. Nejslibnější látkou celé série byl 5-*terc*-butyl-6-chlor-N-(4-merkaptofenyl)pyrazin-2-karboxamid. V sérii nově syntetizovaných látek byl studován vztah mezi strukturou, vypočteným log P, popř. experimentálně zjištěnou lipofilitou, a zkoumanými biologickými vlastnostmi.



R^1 = H, Cl
R^2 = H, *terc*-butyl
R^3 = 2-F, 2-SH, 4-SH, 2-Cl-4-CH_3, 3-CH_3-4-Cl, 2-CH_2OH, 3-CH_2OH, 4-CH_2OH

Autoři děkují za podporu Interní grantové agentuře MZd ČR č. 1A/8238-3, Výzkumnému záměru MŠM ČR č. MSM 0021620822 a Vedeckej grantovej agentúre MŠ SR č. 1/0089/03.

[1] Doležal M., *Prakt. Lékárenství, 1*, v tisku (2005).
[2] Doležal M., Miletín M., Kuneš J., Kráľová K., M*olecules, 7*, 363 (2002).
[3] Doležal M., Palek L., Röslerová Z., Kuneš J., Buchta V., Kráľová K., *The Eight Int. Electronic Conf. Synth. Org. Chem.*, http://www.mdpi.org/ecsoc-8.htm, November 1-30, (2004).

3Po11

UV CURABLE METHACRYLATED PVAL: MODIFICATION VIA ESTERIFICATION

Petr Dzik, Michal Veselý, Iva Králová

Brno University of Technology,Faculty of Chemistry, Department of Physical and Applied Chemistry, Purkyňova 118, 612 00 Brno, E-mail: petr@dzik.cz

In the traditional crosslinking polymer, changes in solubility are brought about by the formation of three-dimensional network from an ensemble of linear chains. A similar result can be achieved by polymerizing an unsaturated monomer in the presence of polyfuctional components, or by further polymerization of unsaturated polyfuctional pre-polymer. If polymerization can be initiated by a photoreaction, such a process may be used as an imaging system, for example.

In order to prepare a cross-polymerizable PVAl, a pendant group containing (meth)acrylic) moiety has to be attached to PVAl macromolecular backbone. These meth(acrylic) moieties are then radically polymerized, forming new polyacrylic chains winding between adjacent PVAl chains. A crosslink is formed when the polyacrylic chain switches sideways and acrylic moieties from another PVAl chains are incorporated. In this manner, most of the PVAl macromolecules get included in a 3D network.

Acrylic acid and/or methacrylic acids are important monomers and monomer precursors for a number of industrial processes. PVAl with pendant (meth)acrylate groups was proved to be readily crosspolymerized. However, the esterification reaction of PVAl is rather tricky. It might seem that the (meth)acrylic esters of PVAl could have been readily prepared by an esterification reaction with some reactive (meth)acrylating agents, such as (meth)acryloyl chloride. However, attempts to do so were unsucceful Therefore, the polymer-analogous equilibrium reaction with acrylic or methacrylic acid is the preferred method.

This paper gives detail information about the homogeneous esterification reaction yielding methacrylated PVAl. It deals with PVAl dissolving and equilibrium establishment, which might represent significant technological challenges, the reaction conditions and product separation ans purification. The product, poly(vinyl alcohol)-co-(vinyl (meth)acrylate), is a water soluble polymer containing varying number of (meth)acrylate units, readily crosslikable by UV curing.

3Po12

DEPANDENCE OF CYCLIZATION AND MECHANICAL PROPERTIES ON DILUENT IN POLYURETHANE NETWORK FORMATION

A. Ďuračková[a,b], H. Valentová[c], M. Dušková-Smrčková[a,c], K. Dušek[a]

aInstitute of Macromolecular Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, Prague, Czech Republic, E-mail:duracko@imc.cas.cz
[b]Bata University Zlín, Czech Republic,
[c]Faculty of Mathematics and Physics, Charles University, Prague, Czech Republic

In the majority of crosslinking systems, formation of intermolecular bonds is accompanied by formation of cycles. The addition of a diluent enhances cyclization and weakens interchain interactions[1,2].

In this contribution, the extent of cyclization is characterized by shift of the critical conversion of functional groups to higher values with increasing dilution and decrease of equilibrium modulus of elasticity. The polyurethane networks were prepared from polycaprolactone diol (PCLD), polycaprolactone triol (PCLT) and a polyester tetrafunctional star crosslinked with a stoichiometrically equivalent amount triisocyanate (trimer of 1,6-diisocyanatohexane) and at various dilutions with diglyme. The gel point conversion, α_g, decreases with the reciprocal initial concentration of functional groups, $1/c_0$. The slope of this dependence decreases with increasing molecular weight of the PCLT component due to longer topological distance of functional groups. The fraction of bonds lost in cycles at concentration of solids 60 %-wt. varied from 10 % for PCLD to 34 % for the tetrafunctional star. Equilibrium mechanical measurements in tension of dry and equilibrium swollen samples characterized the intensity of formation of elastically inactive cycles (IEC). The equilibrium modulus decreases with increasing dilution. For PCLT systems, the concentration of EANC's decreases by about a factor of 2 when passing from bulk samples to those diluted by 70% solvent. The shift of critical conversion α with $1/c_0 \propto (\varphi^0)k$, obeys a power law with exponent κ = 0.41-0.37. For lowering of the reduced equilibrium modulus of swollen samples $Ge(\varphi_2)^{1/3} \propto (\varphi^0)^{\varepsilon}$, the exponent ε varies between ε = 1.9 and 2.7. The decrease of modulus (corrected for different degree of swelling) is due to different network chain dimensions in dry state (factor $(\varphi^0)^{2/3}$), enhancement of formation of elastically inactive cycles (IEC) (exponent σ) and, possibly, decrease in the number of trapped entanglement by dilution at network formation ($\eta \approx$ 2; if all factors are additive $\varepsilon \approx 2/3 + 2 + \sigma$). Since ε - 2/3 ≈ 1.2 - 2, and close to the gel point $G_e(\varphi_2)^{1/3}(\varphi^0)^{2/3} \propto \alpha^3$ and $\alpha^3 \propto (\varphi^0)^{1.2}$ (cf. the gel point measurements), the contribution by trapped entanglements seems to be unimportant.

[1] Dušek K., Ilavský M., *Macromolecules, 19*, 1986.
[2] *Polymer networks. Principles of their formation, structure, and properties.* Stepto, R.F.T., Editor, Blackie Academic & Professional, 1998

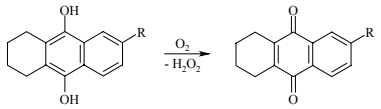
3Po13

VLIV SLOŽENÍ ROZPOUŠTĚDLOVÉHO SYSTÉMU NA KINETIKU OXIDACE 2-ETHYL-5,6,7,8-TETRAHYDRO-9,10-ANTHRAHYDROCHINONU

Vojtěch Fajt, Ladislav Kurc, Libor Červený

VŠCHT Praha, Ústav organické technologie, Technická 5, 166 28 Praha 6, ČR
E-mail: vojtech.fajt@vscht.cz

Rozpouštědlo je jedním z důležitých faktorů ovlivňujících kinetiku reakcí provozovaných v kapalné fázi. Procesem, při němž hraje rozpouštědlo významnou roli, je výroba peroxidu vodíku tzv. anthrachinonovým způsobem.



(1)

V tomto procesu se používají rozličné rozpouštědlové systémy [1]. Jejich srovnání z hlediska vlivu na rychlost oxidace derivátů anthrahydrochinonu bylo cílem předložené práce. Kromě toho bylo předmětem studia upřesnění reakčního mechanismu reakce (1), který předložil Filimonov a kol. [2].

Oxidace byla prováděna kyslíkem ve skleněném vsádkovém reaktoru při teplotách 15 a 30 °C za atmosférického tlaku. Kinetika oxidace byla sledována pomocí aparatury s plynoměrnou byretou [3]. Reakční rychlost byla vyhodnocována z časové závislosti množství spotřebovaného kyslíku. Objem reakční směsi byl 25 ml, koncentrace substrátu 67 mmol.l^{-1}.

Nejvíce používanými rozpouštědlovými systémy při výrobě peroxidu vodíku anthrachinonovým způsobem jsou směsi vyšších alkoholů s alkylaromáty. Proto byly ke studiu vybrány tyto dvě skupiny látek.

Rychlost oxidace byla proměřena v C_1-C_9 alkoholech a v substituovaných benzenech. V alkoholech byla reakční rychlost vyšší než v aromátech, např. v butanolu probíhala oxidace 9-krát rychleji než v toluenu.

Rychlost oxidace v alkoholech rostla se zvyšující se polaritou alkoholu. V řadě alifatických lineárních primárních alkoholů byla tato závislost lineární. V aromatických rozpouštědlech byl pozorován růst reakční rychlosti s rostoucí polaritou substituentu, vyjádřenou pomocí Hammetovy konstanty. Uplatňoval se rovněž stérický efekt substituentu.

Uvedené vlivy rozpouštědla na rychlost oxidace byly vysvětleny nevazebnými interakcemi mezi molekulami substrátu a rozpouštědla. Pro protická rozpouštědla je typická tvorba vodíkových můstků, pro aromatická rozpouštědla interakce typu π–π.

Autoři děkují Grantové agentuře ČR (grant 203/03/H140) a Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy ČR (projekt FRVŠ 1309/2005/G1) za finanční podporu.

[1] G. Goor, E. Staab, J. Glenneberg (Degussa A.-G.): PCT Int. Appl. WO 2005 014471 (2005)
[2] P. I. Filimonov a kol.: *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 233, 453 (1977)
[3] L. Kurc, V. Vopravil, L. Červený: *Res. Chem. Intermed.*, 27, 249 (2001)

3Po14

PREPARATION OF GLUCAN DERIVATIVES WITH MASKED ALDEHYDE GROUP FOR FURTHER CONJUGATION

Pavol Farkaš, Slavomír Bystrický

CHÚ SAV, Dúbravská cesta 9, Bratislava 845 38,
E-mail:chempalo@savba.sk, chembyst@savba.sk

A (1→3)-β-linked poly-$_D$-glucose immune stimulant is isolated from the inner cell wall of *Saccharomyces cerevisiae* [1]. It has been reported that carboxymethylation improves its solubility in water [2]. We prepared and characterized functional derivatives of carboxymethyl-glucan (CMG) containing spacers of different length with dimethylacetales (masked aldehyde groups), ready to bind any amino group. Hydrazide group on the second end of heterobifuncional spacer was used for coupling with carboxyl group of CMG, by means of 4-(4,6-Dimethoxy-[1,3,5]triazin-2-yl)-4-methyl-morpholinium chloride (DMT-MM) as a condensing agent [3]. The obtained CMG derivatives are characterized by HPLC, FT-IR and NMR spectroscopy. The prepared biopolymers are suitable as drugs or antigens carriers, especially in immunology.

[1] N.R. DiLuzio, D.L. Williams, R.B. McNamee, B.F. Edwards, A. Kitahama, *Int. J. Cancer 24*, 773-779, (1979)
[2] S. Ukai, I. Yoshida, A.Honda, K. Nagai, T. Kiho, *Carbohydr. Res. 224*, 201-208, (1992)
[3] M. Kunishima, C. Kawachi, K. Hioki, K. Terao, S. Tani, *Tetrahedron 57*, 1551-1558, (2001)

3Po15

FOTO- A TERMOOXIDÁCIA NANOKOMPOZITOV NA BÁZE iPP A sPP

Agnesa Fiedlerová[1], Štefan Chmela[1], Eberhard Borsig[1,2], Angela Kleinová[1]

[1] Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, E-mail: upolfied@savba.sk
[2] Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava

Vlastnosti polymérnych kompozitov sú výrazne ovplyvňované veľkosťou, tvarom a chemickou štruktúrou plniva. V posledných rokoch sa venuje mimoriadna pozornosť výskumu kompozitných materiálov na báze polymérov plnených nanočasticami. Na rozdiel od konvečných kompozitov, v prípade nano-kompozitov malý

prídavok vhodných nanočastíc a ich účinné zapracovanie do polymérnej matrice výrazne zlepšuje mechanické vlastnosti, znižuje horľavosť a zlepšuje barierové vlastnosti.

Nanokompozity na báze polypropylénu a nanovrstevnatých silikátov sú v súčasnosti predmetom intenzívneho štúdia, pretože tieto nanokompozity by mohli konkurovať mnohým omnoho drahším technickým termoplastom v aplikáciách vyžadujúcich lepšie termochemické vlastnosti. Ďalšiu významnú oblasť aplikácie predstavujú obalové materiály, kde by sa využila skutočnosť radikálneho zvýšenia barierových vlastností týchto nanokompozitov pre plyny a najmä pre kyslík.

Polyolefíny všeobecne a z nich najviac polypropylén sú veľmi citlivé na degradáciu vyvolanú pôsobením atmosferických vplyvov najmä svetla a tepla. Na ochranu sa používajú rôzne typy aditív a to najmä UV-absorbéry, antioxidanty a svetelné resp. tepelné stabilizátory. Stabilizácia je v súčasnosti pre čistý polypropylén zvládnutá pre väčšinu jeho aplikácií. Celkom novým problémom je stabilizácia nanokompozitov na báze polypropylénu. Nepatrné množstvo štúdií sa venuje tomuto problému. V našom príspevku sa venujeme jednak problémom svetelnej a tepelnej degradácie nanokompozitov a jednak sme testovali komerčný svetelný stabilizátor a syntetizovaný kombinovaný stabilizátor na báze stéricky tieneného amínu a fenolu.

Autori ďakujú za finančnú podporu grantu VEGA 2/5108/2.

3Po16

PREPARATION OF ISOTHIOCYANATES MODULATING CELL CYCLE AND INTRODUCTION OF APOPTOSIS IN DIFFERENT TYPES OF CANCER CELL

Ľubomir Floch[1], Igor Šurina[2]

[1]Department of Organic Chemistry and
[2]Department of Wood Technology, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak Technical University, Radlinského 9, 812 37 Bratislava 1, Slovak Republic,
E-mail: lubomir.floch@stuba.sk

Esters of isothiocyanatocarboxylic acids rank among the most potent compounds in the group of 228 isothiocyanates (ITC) which have been tested for cytotoxic activity in HeLa cells and V79 cells. Ethyl 4-isothiocyanatobutanoate (E-4IB) I, formally a derivative of γ-aminobutyric acid (GABA), was one of the most efficient cytotoxic ITCs [1] having also apoptotic activity [2].

With the aim to modify structure of 4EIB to improve cytotoxic and apoptotic activity of six ITC (II-VII) were synthetized by a thiophosgene method in moderate yields.

$$R - (CH_2)_3 - NCS$$

R: $-CO_2Et$ (I), $-CH_2OH$ (II), $-N(CH_3)_2$ (III), $CH_3S(O)$ (IV), 4-HO-C_6H_{11} (V), N-morpholino-, (VI), N-(2-methylpiperidino)-, VII.

Isothiocyanates II - VII were fully characterized by IR, NMR and GC - MS methods. Compounds were used for tests of biological activity and results will be published elsewhere [3].

[1] Horáková K., Jantová S., Stredňanský M., Novotná Ľ., Floch Ľ.: *Anti-cancer Drugs, 4*, 369, (1993).
[2] Bodo J., Jakubíková J., Chalupa I., Bartošová Z., Floch Ľ., Horáková K.,J. Sedlak J.: *Eur. J. Canc. Prevention*, (in press).
[3] Šovčiková A., Floch Ľ., Chalupa I., Sedlák, J., Horáková K.: *Toxicology in Vitro* (in press).

3Po17

SILVER-BASED ELECTRO-CONDUCTIVE PRESSURE-SENSITIVE ADHESIVES

Štefan Florián, Igor Novák, Mária Šivová

Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovakia
E-mail: upolflor@savba.sk

The conductivity of electro-conductive pressure-sensitive adhesives (PSA) in direction of pressure action is to a certain extent dependent on the magnitude of pressure applied [1, 2]. Electrical-grade PSA are designed and manufactured using materials that are physically and chemically stable in the presence of humidity and electrical stress.

In contribution electrical conductivity of acrylic-based PSA filled with silver-plated filler has been studied. Because of intensive decrease in the strength of adhesive joint and simultaneous satisfactory electrical parameters it is necessary to use the concentration of silver-plated filler which corresponds to begin of stabilization of electrical conductivity after exceeding the percolation concentration of filler.

The research was supported by Slovak Grant Agency (Grant. No. 2/4042/04).

[1] Thongruang W., Spontak R. J., Balik C. M., *Polymer, 43*, 2279-2279, (2002)
[2] Das N.C., Chaki T.K., Khastgir G., *Carbon, 40*, 807-816, (2002)

3Po18

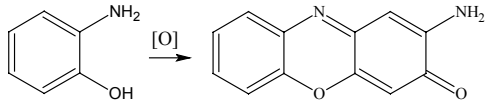
NEW APPROACH TO OXIDATIVE CYCLOCONDENSATION OF 2-AMINOPHENOL TO 2-AMINO-3*H*-PHENOXAZIN-3-ONE

Mirosław Giurg*, Katarzyna Piekielska, Ewa Wiech, Magdalena Gębala, Bartosz Ditkowski, Marcin Wolański, Wanda Peczyńska-Czoch, Jacek Młochowski

Department of Organic Chemistry, Faculty of Chemistry, Wroclaw University of Technology, Wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław, Poland

2-Amino-3H-phenoxazin-3-one (APX), known as questiomycin A, is related to the naturally occurring antineoplastic agent actinomycin D, which acts by inhibiting DNA-directed RNA synthesis and is used clinically for the treatment of certain types of cancer [1]. AXP and its simple derivatives have been studied as antitumor, immunosuppressive, antiviral and antibacterial agents [2]. We applied the title reaction to obtain AXP using dioxygen, manganese (III) complex, hydrogen peroxide or *tert*-butylhydroperoxide in the presence of organoselenium catalyst.

The complex was obtained from activated manganese (IV) oxide and picolinic acid derivatives [3].



Questiomycin A

Dioxygen and hydroperoxides were activated by diphenyldiselenides and ebselen or by enzymes, laccase and horseradish peroxidase. The mechanism of the cyclocondensation reaction is discussed.

[1] H. Malonne, G. Atassi, *Anti-Cancer Drugs, 8,* 811; (1997)
[2] a) A. Tomoda, at all, *Bioorg. & Med. Chem. Lett., 11*, 1057-1058; (2001) b) S. Shimizu at all, Tohoku J. Exp. Med., 203, 47-52, (2004)
[3] L. Achremowicz, J. Młochowski, C. Mora, J. Skarżewski, *J. Pract. Chem., 819,* (1996)

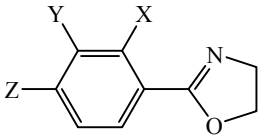
3Po19

KRYŠTÁLOVÁ ŠTRUKTÚRA 2-(2'-HYDROXYFENYL)-2-OXAZOLÍNU, 2-(3'-HYDROXYFENYL)-2-OXAZOLÍNU a 2-(4'-HYDROXYFENYL)-2-OXAZOLÍNU

V. Langer[a], M. Koóš[b], D. Gyepesová[c], M. Sládkovičová[c], J. Lustoň[d], J. Kronek[d]

[a]*Department of Chemical and Biological Engineering, Division of Materials and Surface Chemistry, Subdivision of Environmental Inorganic Chemistry, Chalmers University of Technology, SE-41296 Göteborg, Sweden*
[b]*Chemický ústav SAV, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava*
[c]*Ústav anorganickej chémie SAV, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava,*
E-mail: uachgyep@savba.sk
[d]*Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava*

V ostatnom období je osobitný záujem venovaný cyklickým iminoéterom, z ktorých významnú úlohu v polymérnej chémii hrajú 2-oxazolíny. Predmetom nášho záujmu sú hydroxyfenyl-2-oxazolíny, zlúčeniny, obsahujúce v molekule 2-oxazolín a fenolovú funkčnú skupinu, ktorá môže interagovať s iónovými časticami pri raste reťazca. Vhodné monokryštály pre röntgenovú štruktúrnu analýzu sa získali v troch izomérnych formách: 2-(2'-hydroxyfenyl)-2-oxazolín, $C_9H_9NO_2$, (I), 2-(3'-hydroxyfenyl)-2-oxazolín, $C_9H_9NO_2$, (II), a 2-(4'-hydroxyfenyl)-2-oxazolín, $C_9H_9NO_2$, (III) [alternatívne názvy zlúčenín sú 2-(4,5-dihydrooxazol-2-yl)fenol (I), 3-(4,5-dihydrooxazol-2-yl)fenol (II), 4-(4,5-dihydrooxazol-2-yl)fenol (III)] .



(I) X = OH, Y, Z = H
(II) X, Z = H, Y = OH
(III) X, Y = H, Z = OH

Syntézy týchto zlúčenín sú známe, avšak, ich kryštálová štruktúra nebola doteraz publikovaná. V týchto zlúčeninách odchýľky od koplanarity oxazolínového a fenylového kruhu súvisia s polohou hydroxylovej skupiny na fenylovom kruhu. Koplanárne usporiadanie v (I) je stabilizované silnou intramolekulovou O-H...N vodíkovou väzbou. V (II) je hydroxylová skupina viazaná vodíkovu väzbou na atóm dusíka susednej molekuly. Neočakávane 2-oxazolínový kruh jednej molekuly v asymetrickej jednotke (II) má $^3T_4$ ($^{C2}T_{C3}$) konformáciu pričom 2-oxazolínový kruh v druhej molekule je tak ako aj v (I) a (III) takmer planárny ako sa predpokladalo. V (II) molekuly tvoria tetraméry navzájom viazané slabými vodíkovými väzbami typu C-H...N. V (III) silné intermolekulové O-H...N a slabé C-H...O intramolekulové vodíkové väzby podmieňujú tvorbu nekonečných reťazcov molekúl.

Výpočty geometrie vodíkových väzieb sa uskutočnili pomocou programu VASP (Vienna Ab initio Simulation Package), ktorý využíva metódu periodického DFT.

Táto práca vznikla s podporou Slovenskej grantovej agentúry VEGA (projekty 2/3104/23 a 2/3033/23).

3Po20

PRŮBĚH HYDROLÝZY ORGANOFOSFÁTŮ KATALYZOVANÉ AMFIFILNÍMI PYRIDINIOVÝMI ALDOXIMY

František Hampl, Martin Křováček, Radek Cibulka, František Liška

Ústav organické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, E-mail: hamplf@vscht.cz

Likvidace toxických organických sloučenin fosforu za

mírných a šetrných podmínek představuje problém, který se dosud nepodařilo uspokojivě vyřešit. Jednou z možností jeho řešení je bazická hydrolýza těchto látek v různých nanoagregátech katalyzovaná tenzidy s kovalentně vázanou nukleofilní skupinou[1]. Pyridiniové oximy jako silné -nukleofily ochotně reagují s P-elektrofily, a proto se využívají jako reaktivátory fosforylované či fosfonylované acetylcholinesterasy[2]. Tato skutečnost byla inspirací pro přípravu různých typů micelárních katalyzátorů pro hydrolýzy organofosfátů[3]. Přes zmíněnou vysokou reaktivitu deprotonované hydroxyiminoskupiny vůči P-elektrofilům však existují pochybnosti o použitelnosti amfifilních pyridiniových oximů k detoxikaci organofosfátů. Předpokládá se totiž, že hydrolýza fosforylované či fosfonylované hydroxyiminoskupiny je velmi pomalá a navíc může být doprovázená vedlejšími reakcemi. Proto jsme se v této studii zaměřili na získání podrobnějších a přesvědčivých informací o průběhu hydrolýz modelů toxických organofosfátů katalyzovaných amfifilními pyridiniovými aldoximy. Pozornost jsme věnovali zejména reakčnímu stupni, v němž se obnovuje katalyzátor. Průběh reakcí jsme sledovali pomocí ^{31}P NMR. Dosažené výsledky ukazují, že pyridiniové oximy by mohly být využity k hydrolýzám toxických organofosfátů.

Práce byla vykonána s podporou grantu GAČR 203/04/0488.

[1] Morales-Rojas H., Moss R. A.: *Chem. Rev. 102,* 2497-2521, (2002)
[2] Terrier, F.; MacCormack, P.; Kizilian, E.; Hallé, J. C.; Demerseman, P.; Guir, F.; Lion, C. *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2*, 153-158, (1991)
[3] Kotoučová H., Cibulka R., Hampl F., Liška F.: *J. Mol. Catal A: Chem. 174*, 59-62, (2001)

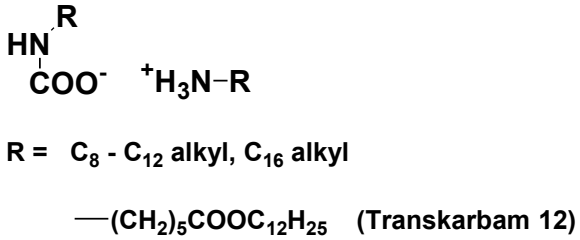
3Po21

TERMOTROPNÍ CHOVÁNÍ AMONIOVÝCH SOLÍ KARBAMOVÝCH KYSELIN

Alexandr Hrabálek, Tomáš Holas, Kateřina Vávrová, Jana Klimentová

Katedra anorganické a organické chemie, Farmaceutická fakulta UK, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, Česká republika, E-mail: hrabalek@faf.cuni.cz

Příspěvek se zabývá změnou chování solí karbamových kyselin vzniklých reakcí alifatických aminů s CO_2 v závislosti na změnách teploty. Soli karbamových kyselin byly podrobeny diferenciální skenovací kalorimetrii (DSC) a termogravimetrické analýze (TGA) a pozorované změny byly porovnány se změnami infračervených a roentgenových spekter získanými při totožném teplotním režimu.



Obr. 1: Sledované sloučeniny

Pásy odpovídající tepelným přechodům byly díky vzájemnému porovnání těchto 4 metod identifikovány a ztotožněny s proběhlými změnami molekuly.

Uvedené poznatky je možné aplikovat na akceleranty transdermální permeace na bázi solí karbamových kyselin, jejichž struktura je velmi podobná studovaným látkám. Je velmi pravděpodobné, že transdermálně akcelerační aktivita těchto sloučenin závisí, mimo jiné, též na pevnosti vazby mezi karboxylem a aminoskupinou v molekule karbamátu a tato studie tak může přispět k poznání mechanismu transdermálně permeačního účinku sloučenin typu Transkarbamů.

Tato práce byla uskutečněna za podpory Výzkumného záměru MSM0021620822 Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky.

3Po22

POROVNÁNÍ NA ZÁKLADĚ DVOU TYPŮ EPOXIDOVÝCH PRYSKYŘIC VYHODNOCENÍ CENTRÁLNĚ SLOŽENÉHO ROTAČNÍHO EXPERIMENTU

Jan Hrbáček, Richard Pavlica*, Antonín Blaha, Kateřina Šimůnková

Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Fakulta technologická, Nám. TGM 275, 762 72 Zlín,
E-mail: hrbacek@ft.utb.cz
**5M s.r.o., Boršice, Areál ZD,*
E-email: Richard.Pavlica@5m.cz

Epoxidové pryskyřice patří mezi známé polymerní matrice, jejichž význam má rostoucí charakter. Pro dosažení dobrých mechanických vlastností je nutno dosáhnout vysokého stupně konverze. Vytvrzovací reakce EP obecně závisí na teplotě a čase vytvrzovaní, přičemž teplota vytvrzování snižuje dobu potřebnou pro vytvrzení. Nízká teplota vyžaduje dlouhé časy pro vytvrzování, naopak vysoká teplota sice nárokuje krátké časy, ale ekonomicky náročnější. Je tedy nutno nalézt optimální hodnoty teplot a časů [1].

Velmi vhodné je užití statistické metody pro určení závislosti ze dvou nezávisle proměnných. nazývané centrálně rotačně složený experiment. Vyhodnocením se získají optimální hodnoty parametrů. Teplota a čas jsou nezávisle proměnné a závislé proměnná bude

- teplota skelného přechodu
- pevnost v ohybu
- modul pevnosti v ohybu

- rázová houževnatost

EP byla vytvrzována na DSC v různých teplotách a časech sestavených dle centrálně složeného rotačního experimentu. Obdobným způsobem byly vyhodnoceny i mechanické zkoušky.

Vyhodnocením byly nalezeny optimální podmínky pro vytvrzovaní. Tato série pokusů byla provedena pro různé typy EP.

[1] Pavlica.R., Vyvrzování polymerní matrice kompozitů [Doktorská dizertační práce], Fakulta technologická, UTB Zlín, 2003.

3Po23

CHARAKTERIZÁCIA POLYSTYRÉNOV, PRIPRAVENÝCH INICIÁCIOU NITROXYLOVÝMI RADIKÁLMI V BLOKU, GPC CHROMATOGRAFIOU A UV SPEKTROSKOPIOU

Ľudmila Hrčková, Štefan Chmela, Igor Lacík

Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovenská republika, E-mail: upollud@savba.sk

Pri radikálovej polymerizácii styrénu za prítomnosti monofunkčných stabilných nitroxylových radikálov a klasických iniciátorov (AIBN, DBP) sa získali pomerne nízke hodnoty polydisperzity molekulových hmotností (M_w/M_n), pri daných reakčných podmienkach (125 °C), čo je v súhlase s dôsledkami mechanizmu živej polymerizácie1. Ďalším charakteristickým znakom živej polymerizácie je lineárny vzťah medzi číselne priemernou mólovou hmotnosťou vznikajúceho polyméru a konverziou monoméru. Napriek experimentálnym chybám, údaje konverzie styrénu a príslušnej mólovej hmotnosti polystyrénu pre monofunkčné nitroxylové radikály[2,3] dobre spĺňajú podmienku linearity. Benzotioxantón-NO° (BTXNO°; 1,1 x 10^{-4} mol/l) sa použil ako koiniciátor pri radikálovej polymerizácii styrénu v bloku iniciovanej DBP (1,0 x 10^{-4} mol/l) pri reakčnej teplote 125 °C. Získal sa polystyrén žltej farby, s pomerne vysokým indexom polydisperzity (1,5-1,7). Podobný priebeh konverznej krivky aj hodnôt polydisperzity sa získal iniciáciou iba BTXNO° (1,1 x 10^{-4} mol/l). Zvýšením koncentrácie BTXNO° (4,4 x 10^{-3} mol/l) sa rýchlosť polymerizácie spomalila, ale získali sa polystyrény s úzkou distribúciou mólových hmotností. Intenzívne žlto zafarbený polymér sa získal aj radikálovou polymerizáciou styrénu, ktorá bola iniciovaná derivátom benzotioxantonu (BTXNOR; R=-$CH(CH_3)$-Ph). Okrem žltého zafarbenia pripravené polystyrény mali aj pomerne úzku polydisperzitu molekulových hmotností. Hodnoty konverzie styrénu a príslušnej mólovej hmotnosti polystyrénu pre BTXNO°a BTXNOR dobre spĺňajú podmienku linearity. Významný prínos použitia uvedených derivátov je v tom, že získaný polymér obsahuje fluorescenčnú značku na konci reťazca, a tak sa môže celý priebeh polymerizácie sledovať absorbčnou a emisnou spektroskopiou v roztoku.

Táto práca vznikla s podporou grantu VEGA 2/5108/25.

[1] Davis K. A., Matyjaszewski K; *Adv. Polym. Sci., 159*, 1-169, (2002)
[2] Georges M.K., Veregin R.P.N., Kazmaier, P.M., Hamer G.K., *Macromolecules, 26*, 987, (1993)
[3] Veregin R.P.N., Georges M.K., Kazmaier P.M., Hamer G.K., *Macromolecules, 26*, 5316, (1993)

3Po24

STUDY OF VISCOMETRIC AND AGGREGATION BEHAVIOR OF HYALURONIC DERIVATIVES

Martin Chytil[1, 2], Miloslav Pekař[1]

[1] Institute of Physical and Applied Chemistry, Faculty of Chemistry, Brno University of Technology; Purkyňova 118, 612 00 Brno; E-mail: pekar@fch.vutbr.cz
[2] CPN Ltd., 561 02 Dolní Dobrouč 401, Czech Republic; E-mail: mchytil@email.cz

The objective of this study is to report about a hydrophobization effect of hyaluronic acid (HA) on its viscosity behavior and to investigate aggregation behavior of the hydrophobically modified HA (hHA) using viscometry. HA is a well-known polysaccharide occurring in many organisms, and its interesting properties, e.g. hydrophilic or rheological, are strongly used in medicine, pharmacy etc. In this study, we investigate HA modified by an attachment of alkyl chains of various lengths and in various degree of modification to the polysaccharide backbone. The HA derivatives were studied in buffered aqueous solutions - a phosphate buffer with NaCl or KCl at physiological concentrations - and measured using automatic capillary microviscometer AMVn (Anton Paar) at various inclination angles of the capillary at 25 °C. Critical concentrations defined as the point of a significant increase of the solution viscosity, intrinsic viscosity [η] and Huggins coefficient k_H were evaluated and discussed with regard on molar mass of the samples, alkyl chain length and substitution degree SD. The HA derivatives display mostly lower values of dynamic and shear viscosity than unmodified HA of the same molecular weight and in the same conditions. Because of HA polyelectrolyte character, its viscous and rheological behavior is strongly dependent on a content of a low molecular salt in the solution, therefore it is necessary to consider and investigate this effect. So far, this effect has been investigated and discussed only for pure unmodified HA.

3Po25

NEOČEKÁVANÉ CYKLIZACE PŘI PŘÍPRAVĚ ESTERŮ α-AMINOKYSELIN SE SALICYLANILIDY

A. Imramovský, J. Vinšová, J. Kuneš

Farmaceutická fakulta UK, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové

Salicylanilidy jsou biologicky aktivní látky s vý-znamnou antituberkulotickou a antifungální aktivitou[1]. V roce 1998 byl navržen nový mechanismus jejich účinku, který je založen na inhibici dvoukomponentových regulačních systémů bakterií[2]. Jejich toxicita a špatná rozpustnost způsobená hydroxy skupinou, která je nezbytná pro účinek, silně znevýhodňuje tuto skupinu potenciálních léčiv. Esterifikace fenolické hydroxylové skupiny vede k nové formě biologicky aktivních látek typu proléčiv, u kterých zůstane zachována vysoká aktivita za současného snížení toxicity.

Výchozí salicylanilidy byly připraveny reakcí 4- popř. 5-substituovaných salicylových kyselin s odpovídajícími halogenovanými aniliny působením chloridu fosforitého v chlorbenzenu za urychlení reakce v mikrovlnném reaktoru. Přímá esterifikace salicylanilidů s aminokyselinami nevede k požadovaným produktům. Převedení aminokyseliny na reaktivnější chlorid ani její N-chráněná a současně C-aktivovaná forma ve formě Leuchova anhydridu neposkytla žádaný ester. Je třeba vycházet z N-chráněných α-aminokyselin, v našem případě jsme použili z důvodu šetrného odbourávání N-benzyloxykarbonylované aminokyseliny. Některé N-chráněné α-aminokyseliny (cbo-D-Ala, cbo-(L/D)-Val a cbo-(L/D)-Phe) poskytly s vybranými substituovanými salicylanilidy (dle biologické aktivity), za aktivace dicyklohexylkarbodiimidem (DCC) požadované estery. U několika reakcí substituovaných salicylanilidů s cbo-Gly nebo cbo-L-Ala došlo k nečekané cyklizaci. Budou diskutovány produkty reakce, presentován pravděpodobný mechanismus vzniku sedmi/popř. devítičlenného cyklu a některé charakteristické fyzikální konstanty. Zároveň bude porovnán vliv substituce salicylanilidů na cyklizaci.

Práce vznikla za finanční podpory grantu IGA MZ 1A/8238-3 a MSM 002162082.

[1] Vinšová J., Imramovský A.: *Česk a slov. Farm. 53*, 294-299: (2004)

[2] Macielag M. J., Demers J. P., Fraga-Spano S. A., Hlasta D. J., Johnson S. G., Kanojia R. M., Russell R. K., Sui Z., Weidner-Wells M. A., Werblood H., Foleno B. D., Goldschmidt R. M., Loeloff M. J., Webb G. C., Barrett J. F., *J. Med. Chem., 41*, 2939 (1998)

3Po26

ŠTÚDIUM NANOKOMPOZITOV NA BÁZE MONTMORILLONITU S BIODEGRADOVATEĽNOU MATRICOU

Ivica Janigová[a], František Lednický[b], Ivan Chodák[a]

[a]Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovenská republika, E-mail:upoljani@savba.sk,
[b]Ústav makromolekulární chemie AV ČR, Heyrovského nám. 2, 16206 Praha, Česká republika

Prítomnosť nanočastíc v polymérnej matrici zlepšuje vlastnosti materiálov (mechanické, termické), pričom tento efekt sa docieli prídavkom iba malého množstva plniva. Montmorillonit (MMT) je vhodné plnivo pre prípravu nanokompozitov pre jeho doštičkovú štruktúru, dostupnosť v prírode a nízku cenu. MMT je vrstevnatý silikát, ktorý môže interkalovať a/alebo exfoliovať v polymérnej matrici za vzniku nanokompozitov. Dôležitú oblasť záujmu predstavujú nanokompozity s biodegradovateľnou matricou.

V predloženej práci sa študovala morfológia a mechanické vlastnosti nanokompozitov na báze biodegradovateľných polymérov. Porovnávali sa dva typy polymérnej matrice - poly(e-kaprolaktón) (PCL) a zmes PCL/termaplastický škrob (Mater Bi). Ako plnivo (do 5 hm.%) sa použili štyri typy MMT s rôznou veľkosťou častíc - J10, BJ40, Kunipia a Nanofil 15, ktorý bol čiastočne interkalovaný. Polymérne kompozity sa pripravovali konvenčným miešaním.

Morfológia lomových plôch vzoriek sa sledovala metódou SEM. Pre lepšiu viditeľnosť častíc plniva v matrici sa aplikovala plazma. Mikrografy nanokompozitov obsahujúcich Nanofil 15 ukázali čiastočne exfoliované plnivo v obidvoch typoch matríc, pričom žiadne pôvodné častice plniva sa nepozorovali. I napriek tomu, že v kompozitoch plnených s J10 a BJ40 sa zachovala väčšina plniva vo forme častíc, na mikrografoch sa súšasne pozorovali aj čiastočne exfoliované tenké vrstvy. Predpokladáme, že i v prípade nemodifikovaného plniva dochádza k čiastočnej interkalácii a/alebo exfoliacii plniva v matrici. V prípade vzoriek plnených Kunipiou sa získali obrázky s najčlenitejším povrchom, s veľkými časticami plniva, pričom sa pozorovalo aj odmáčanie matrice od povrchu plniva. Porovnanie dvoch typov matríc ukázalo lepšie výsledky pri vzorkách na báze Mater Bi.

Výsledky získané z meraní mechanických vlastností sú v súlade s mikroskopickými pozorovaniami.

Autori ďakujú za finančnú podporu Agentúre pre podporu vedy (Projekt č. APVT-51-018502).

3Po27

STANOVENÍ AKTIVITY CHOLINESTERÁZ V KRVI ZA POUŽITÍ 2,2'-DITHIOPYRIDINU

Daniel Jun[1], Jana Tomanová[2], Kamil Kuča[1], Veronika Opletalová[2]

[1] Katedra Toxikologie, Fakulta vojenského zdravotnictví Univerzity obrany, Třebešská 1575, Hradec Králové 500 01, Česká republika
[2] Katedra farmaceutické chemie a kontroly léčiv, Univerzita Karlova v Praze, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, Česká republika

Organofosforové pesticidy (chlorpyrifos, diazinon, parathion) a bojové chemické látky s nervově paralytickým účinkem (tabun, sarin, látka VX) inhibují v těle ireverzibilně enzym acetylcholinesterázu (AChE, EC 3.1.1.7) a představují tak pro člověka vysoce toxickou skupinu sloučenin. Pro stanovení stupně intoxikace organizmu těmito látkami se provádí měření aktivit krevních cholinesteráz, nejčastěji kolorimetricky pomocí modifikované Ellmanovy metody [1,2] za použití 5,5'-dithiobis-2-nitrobenzoové kyseliny (DTNB). Jako substráty pro cholinesterázy slouží acetylthiocholin pro erytrocytární AChE a butyrylthiocholin pro plazmatickou butyrylcholinesterázu (BuChE, EC 3.1.1.8). Tyto látky jsou enzymy štěpeny, podobně jako nativní substráty, na thiocholin a příslušnou kyselinu. Sulfhydrylová (-SH) skupina thiocholinu pak poskytuje reakcí s DTNB intenzivně žlutě zbarvenou 5-merkapto-2-nitrobenzoovou kyselinu, která je kvantifikována spektrofotometricky ve svém absorpčním maximu při vlnové délce 412 nm (pH 7.6, 25 °C). Nevýhodou popsané metody je její interference s hemoglobinem, který má za uvedených podmínek absorpční maximum při 415 nm. Měřenou krev nebo erytrocyty je proto nutné před vlastním stanovením silně zředit, aby celé stanovení probíhalo v lineární pracovní oblasti spektrofotometru. Nevýhodou tohoto postupu je snížení citlivosti měření a nemožnost práce s koncentrovanějšími, aktivnějšími vzorky. V naší práci jsme se zabývali odstraněním popsané interference. Byl otestován alternativní chromogen 2,2'-dithiopyridin, poskytující po reakci s thiocholinem 2-thiopyridin s absorpčním maximem 337 nm. Tato vlnová délka leží mimo oblast dvou hlavních absorpčních maxim hemoglobinu (217 a 415 nm) a náhrada DTNB v metodě 2,2'-dithiopyridinem tak značně zvyšuje měřitelný rozsah aktivit enzymů. Uvedená modifikace je vhodná pro měření aktivit cholinesteráz z diagnostických důvodů při otravách organofosfáty, pro *in vitro* testování nových léčiv pro terapii těchto intoxikací (reaktivátorů AChE) a také pro vývoj inhibitorů cholinesteráz jako potenciálních léčiv Alzheimerovy choroby. Problematikou výzkumu nových reaktivátorů AChE se dlouhodobě zabývá i naše pracoviště.

Tato práce vznikla za podpory grantu č. 126/2005/B-BIO/FaF.

[1] Ellman G. L., Courtney D.K., Andres V., Featherstone, R. M.: A new and rapid colorimetric determination of acetylcholinesterase activity. Biochem. Pharmacol., 7, 88-95, (196)
[2] Bajgar J.:Stanovení aktivity cholinesterázy v lidské krvi - možná modifikace pro polní použití. *Vojenské zdravotnické listy 41*, 78-80, (1972)

3Po28

VLIV TiO_2 NA STABILITU NEMĚKČENÝCH SMĚSÍ PVC

Jaroslav Myšák, Radka Kalousková, Libor Mastný, Zlatko Šrank, Jan Šimek

Ústav polymerů, Ústav anorganické chemie, VŠCHT v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, E-mail: radka.kalouskova@vscht.cz

Práce se zabývá studiem vlivu TiO_2 na tepelnou a světelnou stabilitu neměkčených nestabilizovaných směsí PVC. Ke studiu byly použity tři typy komerční titanové běloby, které se lišily povrchovou úpravou a tím i fotoaktivitou. Všechny směsi byly vystaveny působení monochromatického záření o vlnové délce 254 nm a polychromatického záření s dominantní vlnovou délkou 360nm, které simulovalo UV složku slunečního světla. Směsi byly hodnoceny z hlediska tepelné a barevné tepelné stability a v průběhu světelného namáhání optickým parametrem indexem žlutosti. Bylo zjištěno, že přítomnost TiO2 fotodegradační proces ve srovnání se samotným PVC výrazně zpomalí, degradace probíhá pouze v povrchové vrstvě polymeru. Typ povrchové úpravy TiO_2 však značně ovlivní zpracování a tepelnou stabilitu vysoce pigmentovaných směsí.

Tato práce byla řešena jako součást výzkumného záměru MSM 6046137302

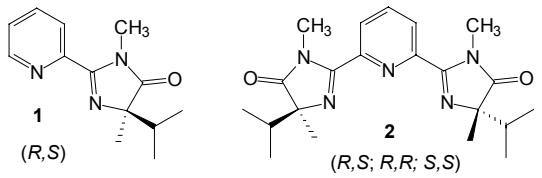
3Po29

HENRYHO REAKCE: NOVÉ MĚĎNATÉ KOMPLEXY NA BÁZI MONO A BIS(IMIDAZOLYL)PYRIDINŮ

Roman Keder, Pavel Drabina, Jiří Hanusek, Miloš Sedlák

Katedra Organické Chemie, Fakulta Chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Nám. Čs. Legii 565, 532 10, Pardubice

V posledních letech dynamicky vzrůstá rozvoj syntézy nových chirálních ligandů a jejich komplexů s přechodnými kovy. Tyto komplexy jsou především využívány jako homogenní katalyzátory v širokém spektru asymetrických syntéz. Námi připravené ligandy na bázi mono a bis (imidazolyl)pyridinů jsou formálně podobné s ligandy oxazolinů „Pymoxy“ a „Pyboxy“, které patří mezi nejznámější a široce používané dusíkaté ligandy [1].



Opticky čisté ligandy 2-(4-isopropyl-1,4-dimethyl-4,5-dihydro-1*H*-imidazol-5-on-2-yl)pyridiny **(1)** a 2,6-bis(4-isopropyl-1,4-dimethyl-4,5-dihydro-1*H*-imidazol-5-on-2-yl)pyridiny **(2)** byly připraveny N-methylací 1*H*-imidazol-5-onových cyklů, jenž byly získány bázicky katalyzovanou cyklyzací chirálních acylovaných 2-amino-2,3-dimethylbutanamidů, jak bylo publikováno v naší předchozí práci [2]. Takto připravené ligandy byly charakterizovány pomocí ^{1}H a ^{13}C NMR spektroskopií, elementární analýzou a optickou otáčivosti.

Komplexy mono a bis(imidazolyl)pyridinů s octanem měďnatým byly využity jako katalyzátory nitroaldolizační Henryho reakce, která patří k jedné z nejvýhodnějších reakcí pro tvorbu C-C vazeb za mírných podmínek [3]. Produktem nitroaldolizační reakce je β-nitroalkanol, v našem případě konkrétně 2-nitro-1(2-nitrofenyl)ethanol resp. 2-nitro-1(4-nitrofenyl)ethanol, který byl izolován v případě opticky čistých komplexů mono(imidazolyl)pyridinů s celkovými výtěžky 49-93 % a s maximálním enantioselektivním přebytkem 15.6 %. Komplexy bis(imidazolyl)pyridinů rovněž katalyzují nitroaldolovou rekaci a to s celkovými výtěžky 64-90 %, ale s nulovým enantioselektivním přebytkem.

Práce byla podpořena projektem Fondu Rozvoje Vysokých škol (FR 353117) a Grantovou agenturou České Republiky (projekt č. 203/04/0646).

[1] Desimoni G., Faita G., Quadrelli P., *Chem. Rev., 103*, 3119 (2003)
[2] Sedlák M., Drabina P., Císařová I., Růžička A., Hanusek J., Macháček, V., *Tetrahedron Lett., 45*, 7723 (2004)
[3] Evans D.A., Seidel D., Rueping M., Lam H.W., Shaw J. T., Downey,C.W., *J. Am. Chem. Soc., 125*, 12692 (2003)

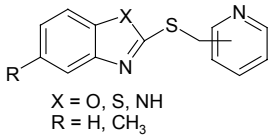
3Po30

HETEROCYKLICKÁ ANALOGA BENZYLSULFANYLDERIVÁTŮ BENZAZOLŮ

Jan Kočí[a], Lenka Zahajská[a], Jarmila Kaustová[b], Věra Klimešová[a]

[a] Farmaceutická fakulta Univerzity Karlovy, Katedra anorganické a organické chemie, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, E-mail: klimeso@faf.cuni.cz;
[b] Zdravotní ústav se sídlem v Ostravě, Národní referenční laboratoř pro Mycobacterium kansasii, Partyzánské náměstí 7, 728 92 Ostrava

V předchozích studiích jsme zjistili signifikantní antimykobakteiální aktivitu u 2-benzyl-sulfanylderivátů benzimidazolu, 5-methylbenzimidazolu, benzoxazolu a benzothiazolu. Sloučeniny se lišily substitucí v benzylové části molekuly. Látka byly aktivní vůči *M. tuberculosis* i vůči potenciálně patogenním kmenům mykobakterií. Přičemž aktivita byla závislá na substituentu v benzylové části molekuly, substituenty s elektronakceptorovými vlastnostmi positivně ovlivňovaly aktivitu[1,2,3]. Tento poznatek nás vedl k tomu, že jsme série 2-benzylsulfanylbenzazolů rozšířili o látky, u nichž je aromatický kruh benzylu nahrazen pyridylem.



Látky jsme získali alkylací daného benzazol-2-thiolu hydrochloridem příslušného chlormethylpyridinu v prostředí dimethylformamidu za přítomnosti methanolátu sodného.

U připravených látek byla testována jejich antimykobakteriální aktivita proti kmenům *Mycobacterium tuberculosis*, *M. avium* a *M. kansasii* (v Šulově půdě mikrometodou pro stanovení minimální inhibiční koncentrace (MIC) vyjádřené v mmol/l). Záměna fenylu za pyridyl nepřispěla ke zvýšení antimykobakteriální aktivity. Zjištěné hodnoty MIC budou presentovány.

Práce vznikla za podpory Výzkumného záměru MSM 0021620822

[1] Kočí J., Klimešová V., Waisser K., Kaustová J., Dahse H.M., Möllmann U., *Bioorg. Med. Chem. Letters, 12*, 3275-3278 (2002)
[2] Klimešová V., Kočí J., Waisser K., Kaustová J., *Farmaco, 57*, 259-265 (2002)
[3] Klimešová V., Kočí J., Pour M., Stachel J., Waisser K., Kaustová J., Eur. *J. Med. Chem., 37, 409-418* (2002)

3Po31

DERIVÁTY ASYMETRICKÝCH AZAFTALOCYANINŮ JAKO „DARK QUENCHERY“

Kamil Kopecký, Petr Zimčík, Zbyněk Musil, Miroslav Miletín

Katedra farmaceutické chemie a kontroly léčiv, Farmaceutická fakulta, Universita Karlova v Praze, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové,
E-mail: kamil.kopecky@faf.cuni.cz

V molekulární biologii jsou používána fluorescenční barviva a zhášeče jejich fluorescence-quenchery pro neradioaktivní značení biomolekul. Výsledné konjugáty se pak používají jako. molekulární sondy. „Dark quenchery“ (např. BHQ™, QSY™, Iowa Black™) mají vysokou schopnost absorpce ve viditelné oblasti spektra a minimální fluorescenci. V současné době je k dispozici pouze několik málo quencherů, jejichž hodnota absorpčního maxima umožňuje použití v kombinaci s barvivy fluoreskujícími při vlnových délkách okolo 650 nm či vyšších. Některé z nich nejsou dostatečně stále za podmínek reakcí v DNA/RNA

syntetizeru, což limituje možnost jejich využití pro značení oligonukleotidů.

Ftalocyaniny a azaftalocyaniny (AzaPc) jsou používány v nejrůznějších oborech, např. v elektrotechnice, fotodynamické terapii. Většina z nich vykazuje vysokou fluorescenci, ale deriváty AzaPc s alkylaminoskupinami na periferii základního skeletu mají vlastnosti, které umožňují jejich použití jako „dark quenchery" v oblasti vyšších vlnových délek. Tyto látky nemají žádnou fluorescenci, jsou chemicky stabilní a absorbují světelné záření v oblasti 650 - 680 nm [1]. Pro syntézy jsme použili substituenty obsahující hydroxylovou nebo karboxylovou funkční skupinu pro možnost vazby na různé biomolekuly (např. oligonukleotid, peptid) za vytvoření molekulární sondy. Základní makrocyklický skelet AzaPc vykazuje velkou schopnost agregace (planární systém), což snižuje rozpustnost a činí velké problémy při purifikaci a charakterizaci. Proto byla použita substituce diethylaminovými skupinami, které jsou dostatečně objemné a oddalují jednotlivé molekuly od sebe natolik, že se tyto látky chovají jako jiné běžné látky a lze je čistit pomocí sloupcové chromatografie. Asymetrické deriváty byly připraveny tetramerizací pyrazindikarbonitrilových monomerů. Vznikla směs látek se statistickým rozdělením. Žádaný produkt byl ze směsi izolován pomocí sloupcové chromatografie. Izolace při nalezení vhodné mobilní fáze probíhala překvapivě snadno, protože jednotlivé izomery se svými vlastnostmi podstatně lišily. Jednotlivé látky byly charakterizovány NMR, UV-VIS a IČ spektroskopií.

Tato práce vznikla za podpory výzkumného záměru číslo MSM0021620822.

[1] Zimcik P., Miletin M., Kostka M., Schwarz J., Musil Z., Kopecky,K.: *J. Photochem. Photobiol. A: Chemistry,163,* 21-28 (2004)

3Po32

THE COMPARING PROPERTIES OF PHOTOREACTIVE MODIFIED PVAL USED IN INKJET PRINTING

Iva Králová, Michal Veselý, Petr Dzik

Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Department of Physical and Applied chemistry, Purkyňova 118, 612 00 Brno,
E-mail: kralova@fch.vutbr.cz

With expansion of inkjet printers to the array branches, requirements on inkjet media are increased too (especially on receiving layers). Once of frequent material which is used for preparation of these layers, is PVAl, which take advantage of solubility of PVAl in water [1]. Our basic aim is based on the idea of introducing photoreactive lateral groups to the backbone macromolecule of receiving layer-forming polymer. We seek highly hydrophilic thin polymer layer with effective conversion. We conducted numerous experiments with PVAl modified by maleic anhydride [2], and with other compounds which contain double bond, as glycidylmethacrylate (GMA), methacrylic acids (MAA), methacryloyl-aminoacetadehyde dimethyl acetal (MAMAA-DA) and its derivatives. These compounds is essentially hydrophobic, leading to lower surface energy and hydrophobization. This modification process is considered by FTIR analysis, which is applied onto thin layers of these products [3]. The changes of functional groups in thin films of polymer materials were measured before and after UV irradiation. This analysis quantitative determined the amount of reactive groups syntetized into the macromolecule PVAl. Ciba® Irgacure® 2959 was used as a precursor for the crosslinking. There was measured sensitivity of receiving layer in dependence on amount of initiator and also degree of conversion of all modified samples [4].

[1] Finch, C. A.: *Polyvinyl Alcohol - Properties and Applications*. 1st edition, New York: John Wiley & Sons, Inc., 1992, 598 p., ISBN 0-471-25892-X .
[2] Králová I., Veselý M., Dzik P.: *Chem.Listy,* 98, 717-731, (2004)
[3] Abd El-Kader, K. M.: *J. App. Polymer Sci., 88*, 589-594, (2003)
[4] Abd El-Kader, K. M., Orabi, A.S.: *Polymer Testing, 21*, 591-595, (2002)

3Po33

PŘÍPRAVA NANOKOMPOZITŮ EXFOLIOVANOU ADSORPCÍ

Jana Kredatusová, Jiří Brožek, Jan Roda

Ústav polymerů, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, Praha 6, ČR
E-mail: kredatuj@vscht.cz

Aniontovou kopolymerací e-kaprolaktonu (CLO) a ε-kaprolaktamu (CLA) lze připravit pestrou paletu materiálů - polyesteramidů (PEA). S rostoucím obsahem CLO jednotek ve struktuře polyesteramidového řetězce se zvyšuje citlivost k biologické rozložitelnosti, ale zároveň dochází ke zhoršení některých mechanických vlastností. U jejich nanokompozitů by bylo možné tyto vlastnosti zlepšit již při nízké koncentraci plniva.

Nanokompozity představují poměrně novou skupinou materiálů, které se obecně skládají z vrstevnatého silikátu dispergovaného jako ztužující fáze v polymerní matrici. Připravují se třemi hlavními způsoby - míšením v tavenině, polymerací *in situ* a exfoliovanou adsorpcí.

Pro přípravu polyesteramidových nanokompozitů jsme využili exfoliovanou adsorpci. Byly připraveny PEA nanokompozity s obsahem CLO jednotek 20-100% ve formě folií. Jako plnivo byly použity dva typy organofilizovaného montmorillonitu (MMT) v koncentraci 5 hm% smektitu.

Úspěšnost přípravy PEA nanokompozitů metodou exfoliované adsorpce závisí jak na použitém kopolymeru, tak i typu organického kationu v MMT a polaritě rozpouštědla. Vhodnost zvolených rozpouštědel byla testována botnáním modifikovaného MMT. Byl stanoven tzv. botnací index a korelován se změnou vzdálenosti vrstev

z WAXS měření. Tyto údaje ukazují na schopnost rozpouštědla oddálit od sebe jednotlivé vrstvy silikátu. Byly též studovány interakce polymer - rozpouštědlo.

Připravené PEA nanokompozity byly charakterizovány pomocí termických metod (TGA, DSC) a stupeň exfoliace plniva pomocí WAXS.

Tato práce vznikla za podpory výzkumného záměru MSM 6046137302.

3Po34

VPLYV CHEMICKEJ MODIFIKÁCIE PAPIERA NA MECHANICKÉ VLASTNOSTI A TERMOOXIDAČNÚ STABILITU

Juraj Kronek[a], Jozef Rychlý[a], Katarína Csomorová[a], Angela Kleinová[a], Soňa Kirschnerová[b], Katarína Vizárová[b], Milan Vrška[b]

[a] *Ústav polymérov, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, E-mail:upolkron@savba.sk*
[b] *Katedra chemickej technológie dreva, celulózy a papiera, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita, Radlinského 9, 81237Bratislava*

Knihy a dokumenty patria medzi tradičné nosiče informácií, preto je snaha o predĺženie ich životnosti. Na starnutie kníh vplýva viacero faktorov a rôzne degradačné procesy sú zapojené do degradácie papiera. Z chemického hľadiska je to najmä termooxidácia a hydrolýza celulózových a lignínových reťazcov. Je známe, že knižné dokumenty z prvej polovice 20. storočia obsahujú papier s pH ~ 3-4, čo urýchľuje hydrolytickú degradáciu papiera. Preto bolo vyvinutých niekoľko metód stabilizácie kyslého papiera. Základnou metódou je deacidifikácia pomocou rôznych organických ako aj anorganických báz [1]. Ďalšou možnosťou je využitie polymérnych materiálov. Z literatúry je známe použitie polyetylénglykolov, polyvinylalkoholov alebo polyvinylacetátov [2]. Ďalšou možnosťou je kovalentné naviazanie modifikačnej látky. Z literatúry je tiež známych veľa reakcií celulózy, pričom medzi najpoužívanejšie patria esterifikácie [3].

Na modifikáciu kyslého papiera sa použila esterifikácia metakryloylchloridom. Na modifikáciu sa použili rôzne dusíkaté bázy. Stupeň naviazania sa sledoval IČ spektroskopiou použitím ATR techniky. Stabilita modifikovaného papiera sa sledovala meraním mechanických vlastností pred a po urýchlenom starnutí ako aj chemiluminiscenčnou technikou. Zistilo sa, že modifikáciou sa znižujú pevnostné charakteristiky, pričom je zrejmý vplyv použitej bázy ako esterifikačného činidla. Z chemiluminiscenčných meraní vyplýva, že promotérom termoxidácie sú vznikajúce amóniové soli, ktoré pôsobia prodegradačne na molekuly celulózy.

[1] V. Bukovsky, *Restaurator, 1999*, 77-96
[2] A. M. A. Nada, S. Kamel, M. El-Sakhawy, *Restaurator, 2000*, 238-247
[3] T. Heinze, T. Liebert, *Prog. Polym. Sci., 26,* 1689-1762 (2001)

3Po35

5-METHYLTHIOSALICYLANILIDY - INHIBITORY HILLOVY REAKCE

Lenka Kubicová[a], Martin Šustr[a], Katarína Kráľová[b]

[a]*Katedra anorganické a organické chemie, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Univerzita Karlova v Praze, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, Česká republika, E-mail: lenka.kubicova@faf.cuni.cz*
[b]*Chemický ústav, Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, Slovensko, E-mail: kralova@fns.uniba.sk*

Salicylanilidy i thiosalicylanilidy mají širokou škálu biologických aktivit [1]. Cílem této práce bylo připravit sérii 5-methylsalicylanilidů **(I)** a 5-methylthiosalicylanilidů **(II)**, substituovaných v anilidové části molekuly, a studovat jejich vliv na fotosyntézu v izolovaných chloroplastech špenátu.

5-Methylsalicylanilidy byly připraveny reakcí kyseliny 5-methylsalicylové s příslušným anilinem a chloridem fosforitým v chlorbenzenu. Reakcí s ethyl-chlorformiátem byly převedeny na 6-methyl-3-fenyl-2*H*-1,3-benzoxazin-2,4(3*H*)-diony. Z nich byly thionací sulfidem fosforečným a následnou alkalickou hydrolýzou připraveny 5-methylthiosalicylanilidy.

Vliv látek **I** a **II** na rychlost vývoje kyslíku v chloroplastech špenátu byl studován spektrofotometricky v přítomnosti 2,6-dichlorfenol-indofenolu (DPIP) jako akceptoru elektronů [2]. Kromě nesubstituovaného 5-methylthiosalicylanilidu byly ostatní 5-methylthiosalicylanilidy účinnější než odpovídající 5-methylsalicylanilidy. Nejúčinnější látka série, 3-brom-5-methylthiosalicylanilid (IC_{50} = 1,4 μmol dm^{-3}), svou účinností překonala simazin i diuron použité jako standardy.

Látky **I** a **II** nepoškozují jádro fotosystému 2 ani část transportního elektronového řetězce až po plastochinon, protože po přidání 1,5-difenylkarbazidu (donor elektronů, jehož místem účinku je intermediát Z^+/D^+) došlo prakticky k obnovení kompletní redukce DPIP.

Práce byla podporována grantem VEGA 1/0089/03, grantem GAUK 312/2005 B CH a výzkumným záměrem MŠMT MSM 0021620822.

[1] Šustr M., Hrnčiarová D., Látalová M., Pravda M., Kubicová L., *Folia Pharm. Univ. Carol.*, *29/30*, 39, (2003)
[2] Kráľová K., Šeršeň F., Csöllei J., *Biol. Plant., 34*, 253, (1992)

3Po36

NOVÉ REAKTIVÁTORY ACETYLCHOLINESTERÁZY INHIBOVANÉ TABUNEM

Kamil Kuča, Daniel Jun, Kamil Musílek, Jiří Cabal, Martina Hrabinová

Katedra Toxikologie, Fakulta vojenského zdravotnictví Univerzity obrany, Třebešská 1575, 500 01 Hradec Králové, Česká Republika, E-mail: kucakam@pmfhk.cz

Nervově paralytické látky (sarin, soman, tabun či látka VX) jsou silné inhibitory enzymu acetylcholinesterázy (AChE; EC 3.1.1.7). Pro zpětné obnovení jeho fyziologické funkce se užívá reaktivátorů AChE. Mezi jejich nejznámější zástupce patří pralidoxim, obidoxim či látka HI-6. Z chemického hlediska se jedná o mono či biskvartérní pyridiniové soli s funkční oximovou skupinou umístěnou na pyridinu v poloze dva či čtyři. Bohužel, žádný ze současně užívaných reaktivátorů nedokáže uspokojivě reaktivovat AChE inhibovanou tabunem.

Díky této skutečnosti jsme se zabývali v posledních třech letech vývojem nových účinných reaktivátorů AChE inhibované tabunem. Na naší katedře byly v rámci tohoto výzkumu vyvinuty dva reaktivátory (K027 a K048), jejichž biologická účinnost se v některých hlediscích vyrovnala a v některých dokonce překonala schopnost v současnosti nejúčinnějšího reaktivátoru AChE, trimedoximu, při léčbě otrav způsobených tabunem.[1]

V této práci se zabýváme přípravou a *in vitro* testováním dvou nových, dle předběžných výsledků slibných, reaktivátorů tabunem inhibované AChE - oximů K074 a K075.[2]

Práce byla podpořena grantem Ministerstva obrany ČR - OBVLAJEP20032.

[1] a) Kuča K., Bielavský J., Cabal J., Bielavská M. *Tetrahedron Lett. 44*, 3123-3215 (2003); b) Kuča K. Bielavský J., Cabal J., Kassa J. Bioorg. *Med. Chem. Lett. 13*, 3545-3547 (2003); c) Kuča K., Cabal J. Centr. Eur. J. *Publ. Health, 12*, S59-S61 (2004).Kuča K., Cabal J., Musílek K., Jun D., Bajgar J. *J. Appl. Toxicol.* (2005), in press.

3Po37

TERMORESPONSIVNÍ POLYMERY JAKO PERSPEKTIVNÍ NOSIČE RADIONUKLIDŮ PRO LOKÁLNÍ RADIOTERAPII

Jan Kučka[a], Martin Hrubý[b]*, Ján Kozempel[a], Ondřej Lebeda[a], Karel Ulbrich[b]

[a]Ústav jaderné fyziky, 250 68 Řež u Prahy, Česká Republika;
[b]Ústav makromolekulární chemie Akademie věd České republiky, Heyrovského náměstí 6, 162 06 Praha 6, Česká Republika,
**E-mail: mhruby@centrum.cz*

Vodorozpustné polymery jsou v současnosti čím dál více studovány jako perspektivní materiály pro biomedicinální aplikace. Jsou užívány jako pomocné látky do lékových forem, jako náhražky krevní plazmy, v nosičových systémech pro léčiva („drug delivery“) a řadě dalších aplikací.

Termoresponsivní (někdy též jinak nazývané termosensitivní) polymery, které jsou rozpustné ve vodném protředí za laboratorní teploty a u kterých nad úzkým teplotním rozmezím kolem teploty lidského těla dojde k jejich fázové separaci z roztoku, mohou být, v případě že jsou biokompatibilní, příkladem polymerů slibných z hlediska medicínských aplikací, např. jako nosiče léčiv. Uvedené vlastnosti mají zejména některé poly(*N*-alkylakrylamidy), poly(*N*-alkylmethakrylamidy), „elastin-like“ peptidy, polyoxyalkeny aj [1].

Radiofarmaka mají z hlediska možnosti vazby na polymerní nosiče řadu výhod. Hlavní výhodou je především to, že efektivní dávka radionuklidu je o několik řádů menší než u chemických léčiv, takže pro dosažení léčebného efektu stačí použít mnohem menší množství radioterapeutika a tedy i nosiče. Výhodou je i skutečnost, že radionuklid nemusí být odštěpen z nosiče aby byl funkční.

V našich laboratořích byl vyvinut nový polymerní termoresponsivní systém [2] založený na telechelických kopolymerech *N*-alkylakrylamidů a *N*-alkylmethakrylamidů s vázaným radionuklidem určený pro lokální radioterapeutické aplikace. Takovou aplikací může být například radioterapie kloubních zánětů či maligních lézí. Protože jsou tyto polymery dobře rozpustné ve vodě při laboratorní teplotě, lze je radionuklidově značit a poté injekčně aplikovat. Při teplotě těla dochází k rychlému fázovému přechodu, takže vyloučený polymer zůstává deponován v místě aplikace.

Doba setrvání polymeru v místě aplikace může být řízena zakopolymerováním vhodné monomerní jednotky nesoucí substituent, jehož řízená hydrolýza vede k zavedení ionizovatelných skupin do řetězce, v důsledku toho ke zvýšení rozpouštěcí teploty nad teplotu těla a tedy k rozpuštění deponovaného polymeru a jeho vyloučení z organismu rychlostí, která může být nastavena s ohledem na poločas rozpadu radionuklidu.

Autoři děkují Grantové agentuře Akademie věd České republiky za finanční podporu (grant č. B4050408).

[1] Gil E. S.; Hudson S.A., *Progr. Polym. Sci., 29,* 1173-1222, (2004)
[2] Hrubý M., Šubr V., Kučka J., Kozempel J., Lebeda O., Sikora A., *Appl. Radiat. Isot*., in press

3Po38

LUMINISCENCE KOMPLEXŮ LANTHANOIDŮ S POLYMERY OBSAHUJÍCÍMI CHINOLINONOVÝ FLUOROFOR

Stanislav Kukla, Drahomír Výprachtický, Věra Cimrová

Ústav makromolekulární chemie AV ČR, Heyrovského nám. 2, Praha 6, 162 06,
E-mail: kukla@imc.cas.cz

Studium interakcí iontů s polyelektrolyty patří k důležitým oblastem makromolekulární vědy (biopolymery, katalýza, separace, …). Navázání lanthanitých kationů na polymerní řetězec a následné měření luminiscence takto vzniklých komplexů lze využít hned několika způsoby. Úzké pásy v emisních spektrech lanthanoidů (pološířka 5-20 nm) lze s výhodou uplatnit při konstrukci moderních elektroluminiscenčních displejů a laserů. V oblasti biodisciplín se luminiscence lanthanoidů využívá pro extrémně citlivou detekci, především v metodách označovaných jako immunoassays. Zde se uplatní dlouhé doby života excitovaných stavů lanthanoidů (řádově milisekundy), neboť jejich emisi je možno měřit i po odeznění luminiscenčního šumu okolního biologického materiálu. Konečně, sledováním změn v luminiscenčních charakteristikách lanthanitých kationtů vázaných na polymerní řetězec lze získat informace o fyzikálně-chemických procesech v rámci samotného polymerního klubka. Budou prezentovány výsledky luminiscenčních měření (stacionární a časově rozlišená luminiscence) komplexů Tb^{3+} s polymerním ligandem, který byl připraven polymeranalogickou reakcí poly(styren-*alt*-maleinanhydrid)u s fluoroforem (7-amino-4-methyl-2(1H)-chinolinon, cs 124) v prvním kroku a methanolem ve druhém kroku. Syntetizovaný polymer tedy obsahuje jednak funkční skupiny pro navázání lanthanoidu [1] (COOH, COOR, COONHR), jednak donor pro účinný přenos energie do excitovaných stavů lanthanoidu [2]. Bude diskutován i efekt neutralizace COOH skupin na polymerním řetězci.

Autoři děkují za podporu projektu Grantové agentuře České republiky (Grant č. 203/04/1372) a Grantové agentuře Akademie věd České republiky (Grant č. IAA 4050409).

[1] D. Výprachtický, V. Cimrová, S. Kukla, L. Machová, *Collect. Czech. Chem. Commun., 69*, 309-321, (2004)
[2] M. Li, P. R. Selvin, *J. Am. Chem. Soc., 117*, 8132-8138, (1995)

3Po39

DFT VÝPOČTY J_{FF} INTERAKČNÍCH KONSTANT FLUORALKENYLOVÝCH ORGANOKOVŮ

J. Kvíčala, M. Skalický, P. Macháček

Ústav organické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika;
E-mail: kvicalaj@vscht.cz

^{19}F NMR spektroskopie je jedním z nejúčinnějších nástrojů pro studium struktur organofluorových sloučenin. Trifluorethenylová skupina je často se vyskytujím seskupením se značným významem v chemii organické i makromolekulární. ^{19}F NMR spektra trifluorethenylové skupiny mají neměnné pořadí velikosti interakčních konstant fluor-fluor *trans*-$^3J_{FF}$ > $^2J_{FF}$ > *cis*-$^3J_{FF}$. Při experimentálním studiu fluorethenyllithií jsme narazili na překvapivý rozpor s tímto pořadím ($^2J_{FF}$ > *trans*-$^3J_{FF}$) [1], který jsme se rozhodli studovat metodami výpočetní chemie.

Bylo prokázáno, že běžné DFT metody neposkytují hodnoty JFF ani s přibližnou přesností a pro tyto výpočty je nezbytné používat výpočetně značně náročné multikonfigurační metody (MC SCF, CAS SCF) [2,3]. To značně limituje tyto výpočty, které jsou omezeny na molekuly s několika málo atomy. Na rozdíl od ostatních fluoralkenů se vypočtené interakční konstanty trifluorethenyllithia [2] značně odlišovaly od námi získaných experimentálních hodnot [1]. Hlavní příčinou je zřejmě zanedbání solvatačních efektů, které u organolithných sloučenin hrají významnou roli.

Naše výpočty fluoralkenyllithií zahrnující mikrosolvataci explicitním přídavkem tří molekul dimethyletheru potvrdily významnou roli solvatace, vzniklé systémy jsou však příliš rozměrné pro použití multikonfiguračních metod. Proto jsme se rozhodli studovat role funkcionálů a bázových setů při DFT výpočtech interakčních konstant na rozsáhlé sérii fluoralkenů. Zjistili jsme, že vzniklé značné chyby v hodnotách interakčních konstant mají systematický charakter a dají se účinně odstranit pomocí lineární korelace. Tuto korelaci jsme použili pro DFT výpočty interakčních konstant mikrosolvatovaných fluoralkenyllithných sloučenin, které potvrdily neobvyklou anomálii u fluoralkenyllithných systémů. Analogické výpočty fluorovaných organohořečnatých a organozinečnatých sloučenin poskytly normální pořadí velikostí interakčních konstant.

Děkujeme Grantové agentuře České republiky (Grant č. 203/02/0716) a Ministerstvu školství České republiky (Projekt č. MSM223100001) za finanční podporu tohoto projektu.

[1] J. Kvíčala, R. Hrabal, J. Czernek, I. Bartošová, O. Paleta, A. Pelter, *J. Fluorine Chem. 113*, 211-218, (2002)
[2] J.E. Del Bene, I. Akorta, J. Elguero, *Z. Phys. Chem. 217*, 1565-1575, (2003)
[3] V. Barone, P.F. Provasi, J. E. Peralta, J. P. Snyder, S. P. A. Sauer, R. H. Contreras, *J. Phys. Chem. A*. 107, 4748-4754, (2003)

3Po40

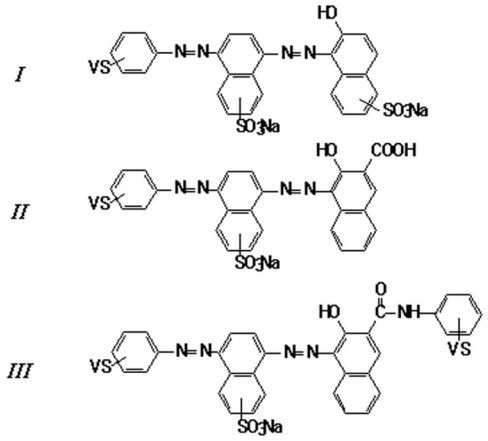
NOVÁ REAKTIVNÍ BARVIVA PRO POLYAMID

V. Lišková[a], T. A. M. D. Pinto[b], L. Burgert[a], R. Hrdina[c]

[a]Ústav polymerních materiálů, Oddělení vláknitých materiálů, a textilní chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice,
E-mail: Vlasta.Liskova@upce.cz
[b]Centro de Química, IBQF, Universidade do Minho, Campus de Gualtar, 4710-057 Braga, Portugal
[c]Katedra technologie organických látek, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 95, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice

Syntetické polyamidy se v současnosti barví převážně barvivy kyselými a kovokomplexními, v menší míře pak barvivy reaktivními a disperzními. Z aplikačního hlediska je hlavní nevýhodou kyselých barviv nízká stálost v praní. Kovokomplexní barviva, která byla doposud v praxi nejvíce používaná, mají sice výborné stálosti v praní, avšak z ekologických důvodů se jejich použití omezuje. Proto je v současné době věnována pozornost reaktivním barvivům1, u kterých se předpokládají vysoké stálosti v praní v důsledku tvorby kovalentní vazby mezi barvivem a substrátem.

Cílem práce bylo připravit a charakterizovat barviva, která by na polyamidu vykazovala jak vysoké hodnoty vytažení a fixací tak uspokojivé výsledky mokrých stálostí. Studium reaktivních barviv pro barvení polyamidu 6 bylo zaměřeno na mono- a bifunkční vinylsulfonová reaktivní barviva obecného vzorce **I-III**.



VS = $SO_2CH_2CH_2OSO_3Na$ nebo $SO_2CH_2CH_2N(CH_3)CH_2COONa$

[1] Zollinger H.: Color Chemistry. VCH Verlagsgesellschaft Weinheim 1991.

3Po41

PROTEINICKÝ ODPAD Z VÝROBY USNÍ SNADNÁ ISOLACE POLYPEPTIDŮ Z KOŽELUŽSKÝCH LUHŮ

Dušan Loníček, Ferdinand Langmaier

Fakulta technologická, Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, nám. T.G. Masaryka 275, 762 72 Zlín, Česká republika,
E-mail: lonicek@centrum.cz

Výroba usní produkuje vedle ekonomicky velmi zajímavého finálního produktu - přírodní usně - zároveň značné množství proteinického odpadu, jehož podíl (v závislosti na typu vyráběné usně) se pohybuje v mezích 50 - 65 % vtaženo na hmotnost výchozí proteinické suroviny. Nutnost ekologické likvidace či zpracování odpadních bílkovin je jednou z hlavních příčin nízké konkurenceschopnosti evropských koželužen v porovnání s koželužnami např. zemí jihovýchodní Asie. Kromě toho je možno tento proteinický odpad využít jako sekundární průmyslovou surovinu např. pro výrobu biodegradabilních polymerů.

Nekolagenní proteiny (především albuminy, globuliny a kreatin), provázejí hlavní bílkovinu kůže - kolagen se v prvních fázích výroby usní isolují převedením na vodorozpustnou formu v alkalických roztocích. Přispívají k amoniakálnímu znečištění odpadních koželužských vod a lze je isolovat v pevné formě okyselením koželužských luhů. Postup isolace těchto proteinů, resp. polypeptidů a jeho ekonomické vyhodnocení je předmětem tohoto sdělení.

[1] Mládek M. a kol. Zpracování odpadů kožedělného průmyslu. SNTL Praha, (1971)
[2] Blažej, A., a kol. Technologie kůže a kožešin. STNL Praha, (1984)

3Po42

AZOBENZENES CONTAINING 4,5-DIHYDROOXAZOLE GROUP. POLYMERIZATION AND PHOTOCHEMISTRY

Jozef Lustoň, Juraj Kronek

Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, 84236 Bratislava, Slovakia,
E-mail: upollust@savba.sk

Utilization of azobenzenes in special applications attracts an interest of chemists on their specific properties. Their photoinduced cis-trans isomerization reaction has been studied for many years [1]. Azo compounds are also known as dyes and pH indicators. More recently, liquid crystalline properties were observed for some compounds containing azobenzene group [2]. The further use of azobenzenes is as nonlinear optical materials or data and energy storage tools [3].

Various 2-oxazoline azobenzenes containing a phenolic group or different short and long alkyloxy chains were prepared. They were used for the preparation of photoreac-

tive polymers by cationic polymerization on 2-oxazoline groups. Cationic polymerizations were performed in a melt and in a solution of high boiling solvents The resulted polymers are linear N-substituted poly(ethyleneimine)s. The prepared polymers represent amphiphilic and stimuli responsive materials and their photochemical behaviour was examined.

[1] Suginome H. In *CRC Handbook of Organic Photochemistry and Photobiology*, CRC Press: Boca Raton, p 830, (1995)

[2] Ober C.K, Jin J.L., Zhou Q., Lenz R. W. Adv. *Polym. Chem., 59*, 103 (1984)

[3] Willner I. *Acc. Chem. Res., 30*, 347 (1997)

3Po43

ANTIMYKOBAKTERIÁLNÍ 5-BROMTHIOSALICYLANILIDY

Miloš Macháček[a], Lenka Kubicová[a], Martin Šustr[a], Jarmila Kaustová[b]

[a]*Katedra anorganické a organické chemie, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Univerzita Karlova v Praze, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, Česká republika, E-mail: machacek@faf.cuni.cz*

[b]*Zdravotní ústav se sídlem v Ostravě, Partyzánské nám. 7, 728 92 Ostrava, Česká republika*

Thiosalicylanilidy mohou mít v závislosti na substituci různé biologické účinky. V r. 1998 byla nalezena antimykobakteriální aktivita u několika thiosalicylanilidů a 5-bromthiosalicylanilidů [1].

Cílem této práce bylo rozšířit sérii 5-bromthiosalicylanilidů o další deriváty substituované v anilidové části molekuly a studovat jejich antimykobakteriální aktivitu proti podmíněným patogenům *Mycobacterium avium* a *M. kansasii*.

Výchozí 5-bromsalicylanilidy byly syntetizovány reakcí kyseliny 5-bromsalicylové s příslušným anilinem a chloridem fosforitým v chlorbenzenu. Reakcí s ethyl-chlorformiátem byly převedeny na 6-brom-3-fenyl-2H-1,3-benzoxazin-2,4(3*H*)-diony. Z nich byly thionací sulfidem fosforečným a následnou alkalickou hydrolýzou připraveny 5-bromthiosalicylanilidy.

Hodnocení antimykobakteriální aktivity bylo provedeno stanovením minimálních inhibičních koncentrací in vitro na Šulově půdě proti sbírkovým kmenům *M. avium* CNCTC My 330/88, *M. kansasii* CNCTC My 235/80 a klinickému izolátu *M. kansasii* 6509/96. 5-Bromthiosalicylanilidy vykazovaly vyšší aktivitu proti oběma kmenům *M. kansasii* než proti *M. avium.* U INH-citlivého kmene *M. kansasii* 6509/96 se nejúčinnější deriváty vyrovnaly isoniazidu (INH) použitému jako standard.

Práce byla podporována grantem GAUK 312/2005 B CH a výzkumným záměrem MŠMT MSM 0021620822.

[1] Waisser K., Kubicová L., Gregor J., Buďová J., Andrlová A., Dršata J., Odlerová Ž, Česk. Slov. Farm., 47, 84, (1998)

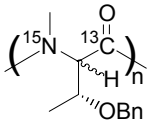
3Po44

SYNTÉZA N-METHYLOVANÝCH OLIGOPEPTIDŮ ($^{13}C_1$,^{15}N-THR)$_N$ NÁSOBNOU UGIHO ČTYŘKOMPONENTNÍ KONDENZACÍ

Martin Mandel

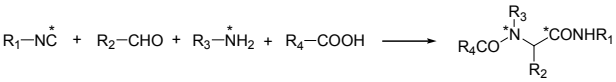
Orgachem s.r.o., Klapkova 96, 182 00 Praha 8, E-mail: orgachem@volny.cz

Za použití Ugiho čtyřkomponentní kondenzace (Ugi-4CC) [1] byla vyvinuta metoda syntézy značených N-methylovaných diastereomerních oligopeptidů **1** (n=1-4) v gramovém měřítku:

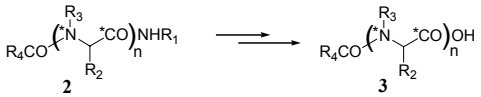


1

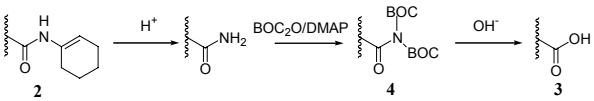
Ugi-4CC představuje vysoce účinný nástroj k syntéze relativně složitých molekul v jediném reakčním stupni:



Při násobné Ugi-4CC slouží kyseliny **3** získané hydrolýzou amidů **2** jako komponenta R_4-COOH v další Ugi-4CC.



Pro převedení amidů **2** na potřebné kyseliny **3** byl nalezen postup za mírných podmínek, které nezpůsobují eliminaci v postranním řetězci threoninového seskupení. Produkty kondenzace **2** (R_1 = 1-cyklohexenyl) po hydrolýze na primární amidy jsou nejprve převedeny na bis-(BOC)deriváty [2] **4**, které následující alkalickou hydrolýzou snadno poskytují požadované kyseliny **3**:



[1] Ugi I.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 21, 810-819 (1982); review: Dömling A., Ugi I.: *Angew. Chem. Int. Ed. 39*, 3168-3210 (2000)

[2] Burk M.J., Allen J.G.: *J. Org. Chem., 62,* 7054-7057 (1997)

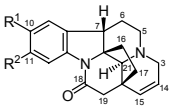
3Po45

19α-HYDROXYSCHIZOGALIN: NOVÝ TYP SCHIZOZYGANOVÝCH ALKALOIDU ZE Schizozygia caffaeoides (Boj.) Baill

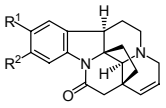
Josef Hájíček[a], Miloš Buděšínský[b], Zuzana Mandelová[a]

[a]*Zentiva Výzkumný ústav pro farmacii a biochemii, U Kabelovny 130, 10237 Praha 10,*
E-mail: zuzana.mandelova@zentiva.cz
[b]*Ústav organické chemie a biochemie, AV ČR, Flemingovo nám. 6, 16610 Praha 6*

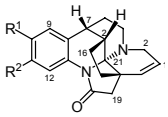
Schizozyganové alkaloidy, representované hlavním alkaloidem (+)-schizozyginem **(1)**, představují malou skupinu hexacyklických *N*-acylindolinových basí, které byly, s výjimkou základního alkaloidu (-)-strempeliopinu[1], isolovány výhradně[2] z afrického keře *Schizozygia caffaeoides* (Boj.) Baill. Byly to i argumenty o značném pnutí skeletu, které nás vedly k tomu, že jsme původně navrženým epimerním basím **4** a **5** přiřadili na základě biogenetických úvah a rozboru NMR spekter strukturu příbuzných *N*-acylaminalů (-)**-6** a (-)**-7** (isoschizozyganové alkaloidy).[3]



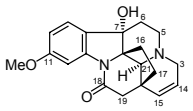
1 $R^1+R^2=OCH_2O$
2 $R^1=R^2=OMe$
3 $R^1=H$, $R^2=OMe$



4 $R^1=R^2=OMe$
5 $R^1=H$, $R^2=OMe$



6 $R^1=R^2=OMe$
7 $R^1=H$, $R^2=OMe$



8

Z listů *S. caffaeoides* jsme isolovali další minoritní alkaloid, jehož struktura byla odvozena na základě analysy NMR spekter. Alkaloid je analogem schizogalinu **(3)**, v němž se však spinový systém pěti vodíků na C-5, C-6 a C-7 zredukoval na systém CH_2-CH_2 a terciární uhlík C-7 se stal kvarterním (δ 93.2 *ppm*), nesoucím zbývající kyslík (hmotové spektrum). Relativní konfigurace hydroxylu byla jednoznačně určena na základě 2D ^1H - ^1H ROESY experimentu, v němž byly nalezeny jeho krospíky s vodíky H-6α a H-21. Alkaloidu byla přiřazena struktura 19α-hydroxyschizogalinu **(8)**, který je prvním zástupcem 7-epischizozyganových alkaloidů.

[1] Hájíček J., Trojánek J.: *Tetrahedron Lett. 23*, 365, (1982)
[2] Renner U.: *Lloydia 27*, 406, (1964)
[3] Hájíček J., Taimr J., Buděšínský M.: *Tetrahedron Lett. 39*, 505, (1998)

3Po46

PROPERTIES OF CARBOXYMETHYLSTARCH ESTER AND ITS BLENDS WITH POLYETHYLENE

V. Mazíková[a], I. Sroková[a], D. Mošková[c], A. Ebringerová[b], V. Sasinková[b]

[a] *Trenčín University of A. Dubček, Faculty of Industrial Technologies, I. Krasku 491/30,*
020 01 Púchov, Slovakia,E-mail: mazikova@fpt.tnuni.sk
[b] *Center of Excellence, Slovak Academy of Sciences, Institute of Chemistry, Dúbravská cesta 9,*
845 38 Bratislava, Slovakia
[c] *Center of Excellence, Slovak Academy of Sciences, Polymer Institute, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovakia*

Water insoluble carboxymethylstarch esters with higher degree of substitution were prepared by esterification of carboxymethylstarch (CMS) with lauroylchloride in DMF/pyridine and dimethylaminopyridine as catalyst. Esterification of various type starches has been reported [1, 2].

The new material prepared in this article was characterised by ^1H NMR, FTIR spectroscopy and elemental analysis. This showed that the esterification had proceeded to a high degree of substitution. The prepared esters exhibit higher thermal stability than the starting material.

The lauroylated CMS was subsequently mixed at various proportions with low density polyethylene (LDPE) in the „Brabender“ device and blends were prepared. The blends were characterized by FT-IR, their thermal properties by TG and DSC methods and their mechanical properties. The thermomechanical properties were discussed in relation to blend composition.

Acknowledgements. This work was realized with the support of the Slovak Grant Agency VEGA, project No. 2/3162/23, and the Agency for support of science and technique, project APVT-51-015802.

[1] Aburto, J., Thiebaud, S., Alric, I., Borredon, E., Bikiaris, D., Prinos, J., Panayiotou, C.: *Carbohydr. Polym. 34,* 101, (1997)
[2] Fang, J. M., Sun, R. C., Fowler, P., Tomkinson, J., Hills C. A. S.: *J. Appl. Polym. Sci. 74*, 2301, (1999)

3Po47

SYNTHESIS AND STRUCTURE DETERMINATION OF SOME GLYCOCONJUGATES RELATED TO MANNOJIRIMYCIN AND SERINE

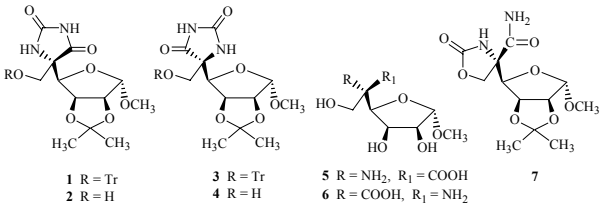
J. Mičová[a], B. Steiner[a], M. Kóoš[a], V. Langer[b], D. Gyepesová[c]

[a]*Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, SK-845 38 Bratislava, Slovakia, E-mail: chemjumi@savba.sk*
[b]*Department of Chemical and Biological Engineering, Division of Materials and Surface Chemistry, Subdivision of Environmental and Inorganic Chemistry, Chalmers University*

of Technology, SE-41296 Göteborg, Sweden
cInstitute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, SK-845 36 Bratislava, Slovakia

Glycoconjugates of lipids and proteins represent a very important group of organic compounds. Due to their responsibility for recognition in biological events, there is growing interest in the use of synthetic glycopeptides as model compounds [1,2].

(*5ī S*)-*5ī*-Triphenylmethoxymethyl-[5ī-methyl (4R)-*2,3*-O-isopropylidene-β-L-erythrofuranosid-4-C-yl)]-imidazolidin-2ī,4ī-dione (**1**) was synthesized from methyl 6-*O*-trityl-2,3-*O*-isopropylidene-α-D-*lyxo*-hexofuranosid-5-ulose and applying the Bucherer-Bergs reaction. As a minor product, the isomer **3** with 5*ī-R* configuration was isolated. Corresponding α-amino acids **5** and **6** were obtained from the above hydantoins by the selective acid hydrolysis of the trityl and isopropylidene groups followed by basic hydrolysis of the hydantoin ring. 2-Oxazolidinone derivative **7** instead of the expected hydantoin was obtained starting from 6-*O*-unprotected 5-ulose [3].



The configuration at C-5' atom was unambiguosly established by single-crystal X-ray diffraction analysis of the hydantoin derivative **2**.

Acknowledgements. Financial support of this work by the Scientific Grant Agency (VEGA, Slovak Academy of Sciences, Grant No. 2/3077/23) is gratefully appreciated.

[1] Varki A. *Glycobiology 3,* 97-130, (1993)
[2] Dwek R. A. *Chem. Rev. 96*, 683-720, (1996)
[3] Mičová J.; Steiner B.; Kooš M., Langer V., Gyepesová, *D. Carbohydr. Res., 339*, 2187-2195, (2004)

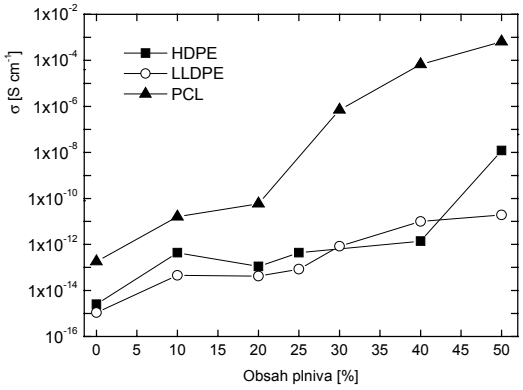
3Po48

MECHANICKÉ A ELEKTRICKÉ VLASTNOSTI KOMPOZITOV NA BÁZE TERMOPLASTICKÝCH MATRÍC A VODIVÝCH CELULÓZOVÝCH VLÁKIEN

Matej Mičušík[a], Mária Omastová[a], Jan Prokeš[b], Katarína Csomorová[a], Igor Krupa[a]

[a] Ústav polymérov, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovensko,
E-mail: upolmmic@savba.sk
[b] Univerzita Karlova v Praze, Matematicko - fyzikálna fakulta, Ke Karlovu 5, 121 16 Praha 2, Česká republika

Celulózové vlákna (CeF) boli pokryté polypyrolom (PPy) a následne použité na prípravu kompozitov s rôznym obsahom plniva. Úplné pokrytie povrchu celulózových vlákien sa dosiahlo pri použití 20 hm.% pyrolu na modifikáciu, čo potvrdili štúdie rastrovacej elektrónovej mikroskopie (SEM) a infračervenej spektroskopie. Modifikované aj nemodifikované CeF boli zamiešané v tavenine do polymérnych matríc, a to do nízkohustotného polyetylénu (LLDPE), vysokohustotného polyetylénu (HDPE) a polykaprolaktónu (PCL). Najvyššia elektrická vodivosť sa dosiahla pri kompozitoch na báze PCL matrice (ako vidieť na obr. 1). PCL matrica obsahujúca 30 hm.% CeF/20 hm.% PPy mala elektrickú vodivosť 7.1◊10^{-7} S cm^{-1} a tá istá matrica plnená s 50 hm.% vodivých CeF dosiahla vodivosť 6.5◊10^{-4} S cm^{-1}. Študovali sa tiež mechanické vlastnosti kompozitov na báze hore uvedených polymérnych matríc obsahujúcich 10 až 50 hm. % modifikovaných ako aj nemodifikovaných celulózových vlákien.



Obr. 1. Závislosť elektrickej vodivosti od obsahu plniva CeF/20 hm.% PPy v LLDPE, HDPE a PCL matrici.

Táto práca bola finančne podporená Vedeckou a grantovou agentúrou Ministerstva školstva SR a Slovenskej akadémie vied (VEGA 2/402404/04, VEGA 2/3054/23) a Ministerstvom školstva, mládeže a športu Českej republiky (MSMT 113 200 02).

3Po49

SYNTHESIS AND PROPERTIES OF SOME 1,2,4-TRISUBSTITUTED PYRROLES

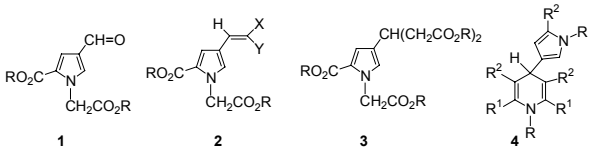
Viktor Milata[a], Jarmila Štetinová[a], Naďa Prónayová[b], Ján Leško† [b], Ognyan Petrov[c]

[a]Department of Organic Chemistry and
[b]Central Laboratory of Chemical Technics, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, SK-812 37 Bratislava, Slovak Republic,
E-mail: viktor.milata@stuba.sk
[c]Department of Organic Chemical Technology, Faculty of Chemistry, University of Sofia, BG-1126 Sofia, Bulgaria

The 2-alkoxycarbonylpyrrolyl derivatives display a broad spectrum of biological activities - analgesic, morphine agonist, spasmolytic, antipyretic, and antiinflammatory activities being some of the most important [1,2].

We present here the synthesis and some transformations of

alkyl (2-alkoxycarbonyl-4-formylpyrrol-1-yl)acetates **1**. These aldehydes, prepared in four steps from pyrrole, were starting materials for substituted 4-pyrrolyl ethylenes 2 and derivatives of glutaric acid **3** (being deaza-analogue of EDTA).



1: R = Me, Et; **2**: R = Et; X = CO_2Et, benzazol-2-yl, (benz)azol-2-ylaminocarbonyl; Y = H, CO_2Et, CN; **3**: R = H, Me; **4**: R = H, CH_2CO_2Me; R^1 = Me, R^2 = CO_2Me

Using cyclocondensations reactions or regioselective alkylation in the solid state, we have obtained derivatives **4**, substituted either on nitrogen atom of pyrrole or that of 1,4-dihydropyridine skeleton [2].

This work was supported by Science and Technology Assistance Agency under the contract No. APVT-20-007304 and Slovak Grant Agency SGA 1/0058/03 and 1/2448/05.

[1] Komiyama K.; Tronquet C.; Hirokawa Y.; Funayama S.; Satoh, O.; Umezawa I.; Oishi, S., *Jpn. J. Antibiot., 39*, 746 (1986).
[2] Štetinová J., Milata V., Prónayová N., Petrov O., Bartovič A., *Arkivoc 127* (2005), http://www.arkat-usa.org/ark/journal/2005/I05_Fisera/1366/LF-1366E.pdf

3Po50

BOTNÁNÍ FUNKCIONALIZOVANÝCH MIKROGELŮ NA BÁZI KOPOLYMERŮ METHYLMETHAKRYLÁTU A BUTYLMETHAKRYLÁTU V ALIFATICKÝCH KETONECH

Jana Mísařová, Ladislav Svoboda, Luboš Prokůpek, Miroslav Večeřa, Jaromír Šňupárek

Univerzita Padubice, Ústav polymerních materiálů, Nám. Čs. Legií 565, 532 10 Pardubice, Česká Republika, E-mail: jana.misarova@seznam.cz

Emulzní polymerací byly připraveny nefilmotvorné vodné disperze mikrogelových částic na bázi methylmethakrylátu, butylmethakrylátu a 2-hydroxyethylmethakrylátu. Mikrogelové částice se lišily stupněm sesítění allylmethakrylátem. Vysušené mikrogely byly redispergovány ve vybraných alifatických ketonech (aceton, methylethylketon, methylpropylketon, methylisopropylketon, methylbutylketon, methylisobutylketon, methylpentylketon a methylisopentylketon). Botnání bylo sledováno pomocí dynamického rozptylu světla, analytického stanovení přístupných hydroxylových skupin a stanovení extrahovatelného podílu. Bylo zjištěno, že botnání mikrogelových částic se zhoršovalo s rostoucím stupněm sesítění allylmethakrylátem. Mikrogely obsahující komonomer butylmethakrylát botnaly v daných rozpouštědlech méně nežli mikrogely neobsahující tento komonomer. Nejvyššího stupně botnání bylo dosaženo v acetonu, nejnižšího v methylisopentylketonu. Rovněž bylo zjištěno, že botnání mikrogelů dosáhlo rovnovážného stavu již po jednom dni redispergace.

3Po51

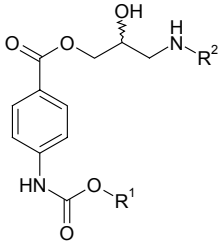
SYNTÉZA A BIOLOGICKÁ AKTIVITA ENANTIOMERŮ ARYLKARBONYLOXYAMINOPROPANOLŮ

P. Mokrý[1], E. Kujová[1], M. Havlů[1], L. Bartošová[2], K. Horká[2], A. Kovařík[2], J. Csöllei[1]

[1]Ústav chemických léčiv a 2Ústav humánní farmakologie a toxikologie Farmaceutické fakulty Veterinární a farmaceutické univerzity Brno, Palackého 1-3, Brno, CZ; E-mail: mokryp@vfu.cz

V chirálním prostředí organizmu mohou interagovat jednotlivé enantiomery léčiva s receptory a enzymy rozdílně, a proto se velmi často liší ve svých farmakologických a toxikologických vlastnostech. Výhodami terapie konkrétním izomerem jsou specifičtější účinek, redukce nežádoucích účinků, jednodušší farmakokinetika. Cílem této práce byla příprava a biologické hodnocení enantiomerů hydrochloridů alkylamino-2-hydroxypropylesterů 4-alkoxy-karbonylaminobenzoových kyselin. K vlastní syntéze jednotlivých izomerů bylo využito reakce chloridu příslušné kyseliny s chirálním syntonem (*R*)- resp. (S)-2,3-epoxypropan-1-olem, při které dochází ke stereospecifickému otevření epoxidového kruhu. Struktura a čistota připravených sloučenin byla ověřena spektrálními a chromatografickými metodami (IČ, NMR, MS, TLC, HPLC). U opticky aktivních meziproduktů a finálních látek byla stanovena specifická optická otáčivost.

Racemát, R- a S-izomer látky **444** byly testovány na laboratorních potkanech kmene Wistar na patofyziologickém modelu tachykardie indukované isoprenalinem. Látky byly aplikovány zvířatům intravenózně v celkové anestézii v dávce 1,5 $mg.kg^{-1}$ hmotnosti zvířete. Oba testované stereoizomery i racemát vykázaly bradykardický účinek s maximem ve 30. sekundě. Maximální pokles srdeční frekvence vyvolaný S-izomerem činil 9,9%, *R*-izomerem 6,5% a racemátem 9,8% výchozí hodnoty.



R^1 = $-C_3H_7$, $-C_4H_9$
R^2 = $-C_3H_7$, $-C_4H_9$, $-CH(CH_3)_2$, $-C(CH_3)_3$

(**444**: R^1 = $-C_4H_9$; R^2 = $-C(CH_3)_3$)

Práce byla realizována za podpory grantu IGA VFU č. 28 /05/FaF.

3Po52

NANOKOMPOZITY NA BÁZE BIODEGRADOVATEĽNEJ POLYMÉRNEJ MATRICE

D. Mošková[a], A. S. Luyt[b], I. Chodák[a]

[a]Ústav polymérov SAV (Centrum excelentnosti CEDEBIPO), Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovakia E-mail: upoldamo@savba.sk
[b]University Free State, Phuthaditjhaba, South Africa

Biodegradovateľné polyméry zaznamenávajú v súčastnosti veľkú pozornosť ako materiály vhodné za zredukovanie enviromentálnych problémov s plastovým odpadom. Pri ich aplikácii je však dôležité zamerať sa na zlepšenie niektorých nevyhovujúcich úžitkových vlastností. V prípade polykaprolaktónu ide najmä o nízku teplotu topenia a relatívne nízku hodnotu modulu pre viaceré aplikácie. Tieto nedostatky je do určitej miery možné odstrániť aplikáciou stužujúcich plnív (oxid kremičitý, sadze). Použitie týchto plnív si vyžaduje relatívne vysoký obsah stužujúceho aditíva (10 - 25 hm. %), ale klasifikácia biodegradovateľných materiálov v zmysle ISO 14855 pripúšťa maximálny obsah nebiodegradovateľných prísad do 5 hm. %.

Z tohto dôvodu sme zamerali pozornosť na nanokompozity s vrstevnatými silikátmi, pri ktorých už pomerne malé množstvo vrstevnatých silikátov v polymérnej matrici spôsobí výrazné zlepšenie termických a mechanických vlastností. V prírodnej forme sú tieto silikáty hydrofilné, na rozdiel od hydrofóbnych matríc, čo spôsobuje zhoršenú dispergáciu plniva do polymérnej matrice. Tieto ťažkosti je možné čiastočne odstrániť zmenou chemického povrchu vrstevnatých silikátov pomocou iónovýmenných reakcií nahradením medzivrstvových katiónov kvartérnymi amóniovými (alebo fosfóniovými) katiónmi.

V tejto štúdii sme použili poly (ε-kaprolaktón) ako biodegradovateľnú polymérnu matricu a ako plnivo viaceré typy vrstevnatých silikátov s rôznou modifikáciou povrchu (rôzne typy bentonitu, SR; Cloisite, USA; Kunipia; Japan) a ich kombináciu s oxidom kremičitým. Nanokompozity sa pripravili miešaním v tavenine v plastografe Brabender. Sledovali sme vplyv množstva a kombinácie plnív na mechanické a termické vlastnosti a ďalšie fyzikálne charakteristiky pripravených nanokompozitov. Mechanické vlastnosti sa podľa očakávania menili s množstvom plniva, v niektorých prípadoch použitých plnív vykazujú závislosti pevnosti v ťahu a ťažnosti maximum pri obsahu plniva 1 - 5 hm. %. Youngov modul rástol so zvyšovaním obsahu plniva. Stupeň rozvrstvenia nanoplniva v kompozite sa sledoval metódou roentgenovej difrakcie a výsledky korelovali s fyzikálnymi vlastnosťami.

3Po53

ŠTRUKTÚRA A VODIVOSŤ POLYPROPYLÉN/MONTMORILONIT/ POLYPYROLOVÝCH NANOKOMPOZITOV

Miroslava Mravčáková[1], Mária Omastová[1], Jürgen Pionteck[2], Petra Pötschke[2], Béla Pukánszky[3]

[1] Ústav polymérov, SAV, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovakia, E-mail: upolmimr@savba.sk
[2] Leibniz Institute of Polymer Research Dresden, Hohe Strasse 6, D-01069 Dresden, Germany
[3]Budapest University of Technology and Economics, Department of Plastics and Rubber Technology, H-1521 Budapest, Hungary

Montmorilonit (MMT) je často používaný ako nanoplnivo na prípravu nanokompozitov s polymérnou matricou. Jeho aktivita ako modifikačného činidla pre polyméry je vo veľkej miere závislá od jeho distribúcie v polymérnej matrici a hlavne na stupni jeho interkalácie alebo exfoliácie. V prípade homogénne distribuovaného MMT v polymérnej matrici sa perkolácia posúva k nižším koncentráciach MMT. Použitie exfoliovaných ílov ako nosičov vodivých polymérov v nevodivej polymérnej matrici môže viesť už pri nízkych koncentráciach vodivej zložky k vzniku vodivých kompozitov.

Pripravili sme polypropylén/montmorilonit/polypyrolové (PP/MMT/PPy) nanokompozity, obsahujúce konštantný podiel 5 hm.%. MMT vzhľadom ku PP, a pre porovnanie polypropylén/polypyrolové (PP/PPy) kompozity s ekvivalentným obsahom polypyrolu, 5-20 hm.%.

Častice práškového PP a MMT (MMT BJ-10, Envitaz, s.r.o., Slovakia) boli kvôli hydrofóbnemu charakteru PP rozptýlene v dvoch prostrediach: vo vodnom roztoku aniónového surfaktantu, kyseliny dodecylbenzylsulfónovej (DBSA), alebo v roztoku voda/methanol. Po modifikácii suspenzie PP s MMT pyrolom bol produkt odfiltrovaný a vysušený. Kompozity boli spracované priamo lisovaním, alebo zamiešaním v tavenine a následným lisovaním. Širokouhlová rőntgenová analýza (WAXS) potvrdila interkálaciu PPy medzi vrstvy MMT v PP/MMT/PPy nanokompozitoch. Prítomnosť surfaktantu DBSA signifikantne zmenila štruktúru vrstiev a stabilizovala štruktúru nanokompozitov počas spracovania, čo potvrdili reologické merania a aj merania elektrickej vodivosti.

Táto práca bola finančne podporená Agentúrou pre podporu vedy a techniky (APVT 51-01852).

3Po54

PERYLENE AS ALTERNATIVE PROBE IN AGGREGATION STUDIES OF HYDROPHOBIZED HYALURONATES

Filip Mravec[a,b], Jiří Běťák[a], Miloslav Pekař[a]

[a]*Ústav fyzikální a spotřební chemie, Fakulta chemická, Vysoké učení technické v Brně, Purkyňova 118, 612 00 Brno, E-mail: pekar@fch.vutbr.cz*
[b]*CPN, spol. s.r.o., 561 02 Dolní Dobrouč 401, E-mail: filip.mravec@centrum.cz*

The steady-state fluorescence measurements, using perylene (Pe) as a probe, are presented. Perylene is widely used fluorescent probe for determination of aggregation or self-aggregation behaviour of many surfactants. Polysaccharides surfactants based on hydrophobized hyaluronic acid (hHA) are in the forefront of our research. Previous tests with pyrene (fluorescent probe with unique response to the polarity of microenvironment) have showed utility of fluorescent techniques in determination of the critical aggregation concentration. For confirmation of these results, the new probe was investigated.

First step was study of perylene spectral properties in solvents with different relative permittivity. Second step was determination of the critical micelle concentration (CMC) of simple micellar system - water/sodium dodecyl sulphate (SDS). Determined value of the CMC of the SDS was confirmed by the tabulated value. In the next step results for dilute aqueous solutions of hHA with pyrene and perylene were compared. hHA was used in the two different molecular weights fraction, 183 000 and 134 000 g/mol, and three degrees of substitution. All results showed that perylene is suitable probe for investigation of aggregation properties of hHA dilute solutions.

3Po55

SYNTHESIS OF THREE BISPYRIDINIUM COMPOUNDS BEARING 3-OXAPENTANE LINKER AND EVALUATION OF THEIR REACTIVATION ACTIVITY AGAINST CHLORPYRIFOS AND METHYLCHLORPYRIFOS-INHIBITED ACETYLCHOLINESTERASE

K. Musilek[a], K. Kuča[b], D. Jun[b], Y. S. Jung[c], T. H.Kim[c], V. Dohnal[d], M. Dolezal[a]

[a]*Department of Pharmaceutical Chemistry and Drug Control, Faculty of Pharmacy in Hradec Kralove, Charles University in Prague, Heyrovskeho 1203, 500 05 Hradec Kralove, Czech Republic, E-mail: musilekk@faf.cuni.cz*
[b]*Department of Toxicology, Faculty of Military Health Sciences, University of Defence, Trebesska 1575, 500 01 Hradec Kralove, Czech Republic*
[c]*Medicinal Science Division, Korea Research Institute of Chemical Technology, P.O. Box 107, Yusong, Daejeon 305-606, Korea*
dDepartment of Food Technology, Mendel University of Agriculture and Forestry Brno, Zemedelska 1, 613 00 Brno, Czech Republic

The reactivators of acetylcholinesterase (AChE, EC 3.1.1.7) are very important components in the treatment of intoxications caused by organophosphate inhibitors such as nerve agents and insecticides [1]. These inhibitors covalently bind on the active site of mentioned enzyme and irreversibly inhibit its activity. The reactivator breaks the inhibitor-enzyme covalent bond and restores ezyme activity. Unfortunately, there is no reactivator applicable for every type of inhibitor, it means that every structural change in the molecule of inhibitor needs a specific structure of the reactivator [2]. Therefore, development of more potent compounds able to reactivate broader spectrum of inhibitors is a major challenge actual from the point of view of war operations, accidents or terroristic attacks.

Three potential AChE reactivators were synthesized using novel synthetic pathway and modification of the method for preparation of 3-oxapentane linker [3]. Their potency to reactivate acetylcholinesterase inhibited by insecticides chlorpyrifos and methylchlorpyrifos was tested *in vitro*. Promising results were obtained. The reactivation potency of these compounds depends on structural factors such as presence of quaternary nitrogen atoms, length of the linking chain between both pyridinium rings and position of the oxime moiety at the pyridinium ring.

This work was supported by the grant of Charles University No. 126/2005/B-BIO/FaF and by the Research Project MSM 0021620822.

[1] Bajgar J., *Adv. Clin. Chem., 38*, 151-216, (2004)
[2] Kuca K., Patocka J., *J. Enzym. Inhib. Med. Chem., 19*, 39-43, (2004)
[3] Kim T. H., Kuca K., Jun D., Jung Y. S., *Bioorg. Med. Chem. Lett., 15*, 2914-2917, (2005)

3Po56

PRÍPRAVA, VLASTNOSTI A STABILIZAČNÁ ÚČINNOSŤ SILÁNOVÉHO STABILIZÁTORA OBSAHUJÚCEHO 2,6-DI-TERT-BUTYL-4-METYLFENOLOVÚ ŠTRUKTÚRNU JEDNOTKU

Tomáš Nedelčev, Jozef Rychlý, Katarína Csomorová, Igor Krupa

Ústav polymérov, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovenská republika, E-mail: upoltned@savba.sk

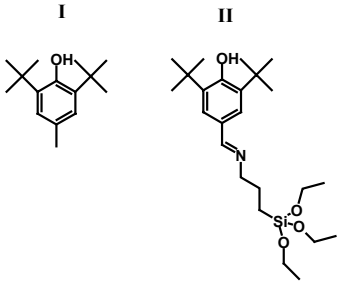
Polyolefíny sú citlivé na degradáciu voľnými radikálmi z atmosféry ako aj radikálmi vznikajúcimi počas spracovania. Tento proces spôsobuje stratu fyzikálnych a mechanických vlastností. Fenolické antioxidanty, ktoré vystupujú ako H-donory, sú často využívané ako stabilizátory polyolefínov. Kľúčová reakcia je vznik hydroperoxidu z peroxylového radikálu, odtrhnutím vodíka z fenolickej skupiny, za vzniku fenoxylového radikálu. Stabilitu fenoxylového radikálu spôsobujú dve *terc*-butylové skupiny v orto polohách voči

fenoxylovému radikálu [1].

Problém stabilizátorov s nízkou molekulovou hmotnosťou je v ich extrakcii a vyparovaní sa z polyméru.

2,6-di-*tert*-butyl-4-metylfenol **(I)** sa používa ako stabilizátor pre obalové fólie na potraviny. Jeho nevýhodou je vysoká pohyblivosť v polyméroch. Takýto stabilizátor migruje k povrchu fólie a potom sa odparuje. Pri normálnej teplote dochádza denne k 1%-nej strate stabilizátora z fólie [2].

Cieľom tohoto príspevku je diskutovať možnosti prípravy, vlastností a stabilizačného účinku nového typu stabilizátora a to 4-((3-(trietoxysilyl)propylimino)metyl)-2,6-di-*tert*-butylfenolu **(II)**, pripraveného z modifikovaného **(I)** reakciou s 3-aminopropyltrietoxysilánom.



Zavedením trietoxysilylovej skupiny sa zvýšila molekulovú hmotnosť stabilizátora, jeho teplota topenia, tepelná stabilita a tým sa získal výrazný stabilizujúci efekt na termooxidáciu polypropylénu, chrakterizovaný termogravimetrickými meraniami ako aj meraním chemiluminiscencie.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu vedy a techniky prostredníctvom finančnej podpory č . APVT-99-035004

[1] Zweifel H., *Plastics additives handbook.* 5th ed. Munich: Hanser Publisher; (2001)
[2] Wilson V. H., *Text. Inst. World Conf., Dundee,* (1990)

3Po57

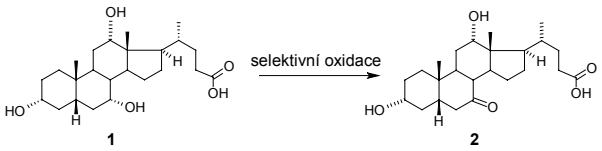
SELEKTIVNÍ OXIDACE KYSELINY CHOLOVÉ: SROVNÁNÍ REAKČNÍCH PODMÍNEK POMOCÍ ^{1}H-NMR SPEKTER

Nguyen Thi Thu Huong[a], Roman Kuželka[a], Pavel Drašar[b]

[a]*Katedra chemie, PF UJEP v Ústí nad Labem, České mládeže 8, 40096 Ústí nad Labem,*
E-mail: nguyen@pf.ujep.cz
[b]*Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6, E-mail: Pavel.Drasar@vscht.cz*

U systémů tetrapyrrolového makrocyklu se spiroanelovaným steroidním substituentem lze očekávat nové a velmi cenné vlastnosti např. komplexotvorné a schopnost selektivní molekulární interakce, fluorescenční a schopnost v excitovaných tripletových stavech podílet se v elektronové výměně. Tyto molekuly také mohou mj. sloužit jako selektivní molekulární receptor na organické i anorganické sloučeniny, dále by se daly využít např. v oblastech chemie molekulového rozpoznání, k výstavbě iontových kanálů pro přenos iontů a nebo ve fotodynamické terapii (PDT). Jedna z možných syntéz steroidních spiroanelovaných tetrapyrrolových derivátů vychází z jejich ketoderivátů.1 Pro syntézu spiroanelovaných tetrapyrrolových derivátů na bázi žlučových kyselin jsme připravovali ketoderivát cholové kyseliny a to její selektivní oxidací. Pro účel své práce jsme si zvolili běžně dostupná oxidační činidla: N-Bromsukcinimid (NBS)2 a brom.

V práci jsme se zaměřili na optimalizaci reakčních podmínek.



Průběh všech reakcí byl sledován TLC a reakce byly ukončeny, když v reakční směsi začal objevovat produkt vyššího stupně oxidace. Poměr hlavního produktu a vedlejších produktů (včetně výchozí látky) byl vypočten na základě ^{1}H-NMR spekter surových produktů.

Jako nejlepší se ukázala oxidace s použitím 1,12 ekvivalentu NBS ve směsi rozpouštědel aceton:voda (5:2) při laboratorní teplotě po dobu 3,5 hod a další hodinu zahřívání.

[1] Dukh M., Drašar P., Černý I., Pouzar V., Shriver J.A., Král V., Sessler J.L., *Supramol. Chem. 14*, 237 (2002)
[2] Fieser L, Rajagopalan S, *J. Am. Chem. Soc. 71*, 3935 (1949)

3Po58

VPLYV ZOSIETENIA NA VLASTNOSTI POLYETYLÉNU A POLYKAPROLAKTÓNU

Zuzana Nógellová, Ivica Janigová, Ivan Chodák

Ústav polymérov SAV (Centrum excelentnosti CEDEBIPO), Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava,
Slovenská republika, E-mail: upolnoge@savba.sk

Zosietenie je jedným zo spôsobov chemickej modifikácie polymérov, ktoré vedie k zmene vlastností. Zosietením sa materiál stáva nerozpustným v rozpúšťadlách, v ktorých sa v nezosietenom stave rozpúšťa. Dochádza k štrukturálnym zmenám, ktoré spôsobujú zmeny v mechanických vlastnostiach. Zosietenie môže byť zaujímavé v niektorých prípadoch aj pre kompatibilizáciu zmesí niektorých polymérov, napr. PE/PP [1] alebo PHB/PCL. Predovšetkým s ohľadom na možnosti, ktoré poskytuje kompatibilizácia zmesí, sme sa v tejto práci zaoberali vplyvom zosietenia na vlastnosti jednotlivých zložiek zmesí (polyetylén - PE a polykaprolaktón - PCL). Ako sieťovacie činidlo sa použil 2,5-dimetyl-2,5-ditercbutylperoxyhexín (Luperox 130) v koncentračnom rozsahu 0,1-5hm.%. Použili sa dve rôzne techniky prípravy vzoriek: V prípade polyetylénu sa peroxid zamiešal impregnáciou na práškový polymér. V prípade polykaprolaktónu sa polymér zmiešal s peroxidom v tavenine. Vlastné sieťovanie oboch polymérov,

t.j. termický rozklad peroxidu a následné vytvorenie chemických väzieb medzi makromolekulami, prebiehalo pod tlakom - v lise. U získaných vzoriek sa hodnotila miera zosietenia, t.j. nerozpustný podiel a stupeň napučania. V rozmedzí 0,25-5hm.%peroxidu sa dosiahol nerozpustný podiel 40-95hm.% pre PE a 75-95hm.% pre PCL.

Mechanické vlastnosti boli odlišné pre oba polyméry. V prípade polyetylénu pevnosť a ťažnosť prechádza cez maximum pri 1hm.% peroxidu, kým Youngov modul pružnosti sa znižuje s rastom obsahu peroxidu. V prípade polykaprolaktónu sa hodnoty pre všetky merané mechanické vlastnosti znižujú.

Okrem mechanických vlastností sa u niektorých vybraných vzoriek hodnotili kryštalizačné charakteristiky pomocou DSC a dynamicko-mechanické vlastnosti. Výsledky naznačujú, že hoci celkový mechanizmus sieťovania je podobný pre oba polyméry, v detailoch sa pozorujú rozdiely, naznačujúce určité rozdiely v štruktúre vytvorenej siete.

Táto práca je podporovaná z grantu VEGA č.2/4024/04.

[1] I. Chodák, Z. Nógellová, B. V.Kokta: *Macromol.Symp., 147*, 83-90, (1999)

3Po59

SURFACE PROPERTIES OF POLYETHYLENE TEREPHTHALATE MODIFIED BY ELECTRIC DISCHARGE PLASMA

Igor Novák, Marián Števiar, Ivan Chodák

Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovakia, E-mail: upolnovi@savba.sk

The modification of polymers by electric discharge plasma [1, 2] is a dry process of modification used for increasing of hydrophilicity and surface energy of polymers. The most important feature of this modification method is that the surface properties of polymers are modified without changing their important bulk properties. In our studies the surface and adhesive properties of barrier discharge plasma modified poly(ethylene terephthate) (PET) have been studied. Depending on the gases used, different functional groups are formed in a thin surface layer of the polymer. An significant increase of surface energy of PET after modification by barrier discharge plasma in N_2 and O_2 atmosphere, as well as higher strength of adhesive joints of modified PET to more polar polymer have been found.

This research was supported by the Slovak Grant Agency VEGA (grant No. 2/4042/04)

[1] Noeske M., Degenhardt J., Strudthoff S., Lommatzsch U., *Intern. J. Adhes. Adhesives,* 24, 171 - 177, (2004)
[2] Šimor M., Ráhel J., Černák M., Imahori Y., Štefečka M., Kando M., *Surf. Coat. Technol., 172*, 1 - 6, (2003)

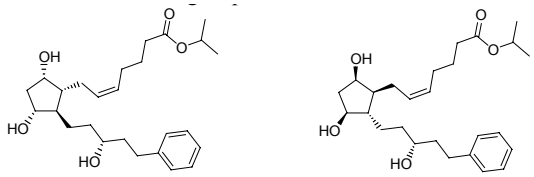
3Po60

SYNTHESIS OF LATANOPROST DIASTEREOISOMERS

Iva Obadalová, Josef Hájíček

Zentiva Výzkumný ústav pro farmacii a biochemii, U Kabelovny 130, 102 37 Praha 10, E-mail: iva.obadalova@zentiva.cz

A new synthesis of latanoprost diastereoisomers is described which utilizes a highly stereoselective Michael addition of higher-order cuprate to a chiral cyclopentenone derived from G-lactone in the crucial skeleton-forming step [1].



latanoprost tetraepilatanoprost

[1] I. Obadalová, T. Pilarčík, M. Slavíková, J. Hájíček, *Chirality, 17*, S109-S113, (2005)

3Po61

FIRST TOTAL SYNTHESIS OF POTASSIUM AESHYNOMATE AND ITS NOT NATURAL STEREOISOMERS

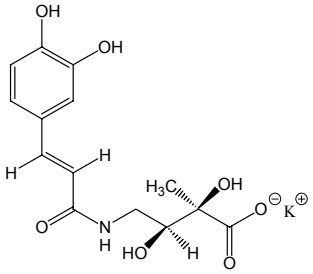
Tomasz Krzysztof Olszewski[c], Philippe Coutrot[a], Stephanie Claudel[a], Pierre Mutzenardt[a], Claude Grison[b], Bogdan Boduszek[c]

[a]*Laboratoire de Chimie Organique Biomoleculaire, UMR 7565, campus Victor Grignard BP 239, 54506 Vandoeuvre-les-Nancy, France*
[b]*Laboratoire de Chimie Biomoleculaire,FRE 5032 - ERT 5, 8 rue de l'Ecole Normale, 34296 Montpellier, France*
[c]*Faculty of Chemistry, Department of Organic Chemistry, Wroclaw University of Technology, Wybrzeze Wyspianskiego 27, 50-370 Wroclaw, Poland, E-mail: tomasz.olszewski@pwr.wroc.pl*

Potassium aeshynomate **1** is a leaf-opening substance, existing in nycnastic plant, *Aeshynomene Indica Linneaus*. Yamamura and co-workers [1], have isolated potassium aeshynomate **1** and determined its structure. The authors, employing a variety of NMR techniques, concluded that, in the diol moiety of 1 stereochemical relationship between hydroxyl groups is anti one. Nonetheless, it was not possible to determine the absolute configuration of the natural **1**.

We report a study, concerning determination of the configurational structure of potassium aeshynomate **1**, along with the first total synthesis of four stereoisomers of this natural γ-aminoacid. The total synthesis was achieved using the Sharpless AD-mix reagent for catalytic,

asymmetric dihydroxylation [2] of vinylogous glycines [3] as a key step. Resulting γ-amino-α, β-dihydroxyesters were deprotected and coupled with caffeic acid. Deprotection of the obtained esters, followed by reaction with 0.13 M MeOK/MeOH solution, afforded the desired potassium salt 1. The related stereochemistry of the four stereoisomers of 1 was assigned from their NMR data, by comparison with the data obtained from the natural 1. The determination of the specific rotations has shown that, the asymmetric dihydroxylation of the **cis**-vinylogous glycine with the AD-mix-α reagent, was the appropriate methodology to obtain the natural potassium aeshynomate **1**.



Potassium aeshynomate **1**

[1] M. Ueda, T. Hiraoka, M. Niwa, S. Yamamura; *Tetrahedron Lett., 40*, 6777-6780, (1999)
[2] H. C. Kolb, P. G. Andersson, K. B. Sharpless; *J. Am. Chem. Soc., 116*, 1278-1285, (1994)
[3] C. Grison, S. Geneve, E. Halbin, P. Coutrot; *Tetrahedron, 57*, 4903-4923, (2001)

3Po62

PRÍPRAVA A VLASTNOSTI POLYPYROLU OBSAHUJÚCEHO BIS(2-ETYLHEXYL) SULFOSUKCINÁT

Mária Omastová[1], Kada Boukerma[2], Pavol Fedorko[3], Mohamed M. Chehimi[2], Miroslava Trchová[4]

[1]Ústav polymérov, SAV, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovensko, E-mail: upolmaom@savba.sk
[2]Université Paris 7-Denis Diderot, 1 rue Guy de la Brosse, 75005 Paris, France
[3]Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, STU, 812 37 Bratislava, Slovensko
[4]Ústav makromolekulární chemie, AV ČR, 162 06 Praha 6, Česká republika

Polypyrol (PPy) bol pripravený chemickou oxidačnou polymerizáciou pyrolu vo vodnom roztoku obsahujúcom oxidačné činidlo, síran železitý, chlorid železitý, alebo peroxodvojsíran draselný a aniónový surfaktant, bis(2-etylhexyl) sulfosukcinát sodný (AOT). Zistilo sa, že aniónová časť molekuly surfaktantu sa počas syntézy zabudováva do polymérneho reťazca, čo bolo dokázané elementárnou analýzou, FTIR spektroskopiou a tiež štúdiom morfológie PPy produktov [1]. Metódou röntgenovej fotoelektrónovej spektroskopie (XPS) sa merali spektrá syntetizovaných produktov. XPS analýzy ukázali, že pri nižšom obsahu AOT v polymerizačnom roztoku anióny surfaktantu pôsobia v PPy štruktúe ako ko-dopanty, zatiaľ čo pri vysokej koncentrácii AOT vzniknutý produkt obsahuje AOT anióny ako ko-dopanty a zároveň AOT je prítomný ako surfaktant na povrchu PPy častíc [2]. Elektrická vodivosť PPy-AOT produktov významne závisí od druhu oxidačného činidla a taktiež závisí od počiatočného mólového pomeru monoméru k aniónovému surfaktantu. Optimálny mólový pomer [pyrol]/[AOT] = 7 bol stanovený pre syntézu produktu s najvyššou elektrickou vodivosťou, 27 S cm^{-1}. Ak sa použil $Fe_2(SO_4)_3$ ako oxidačné činidlo, zistilo sa, že nárast vodivosti pripraveného PPy-AOT je okolo 3 rádov pri optimálnom mólovom pomere monoméru ku surfaktantu, pričom vodivosť PPy-SO_4 pripraveného bez AOT je iba 0,05 S cm^{-1}.

Táto práca bola finančne podporená Vedeckou a grantovou agentúrou Ministerstva školstva SR a Slovenskej akadémie vied (VEGA 2/4024/04 a VEGA 1/2021/05).

[1] M. Omastová, M. Trchová, J. Pionteck, J. Prokeš, J. Stejskal, *Synth. Met. 143*, 153, (2004).
[2] K. Boukerma, M. Omastová, P. Fedorko, M.M. Chehimi, *Appl. Surface Sci.*, v tlači.

3Po63

ŠTRUKTÚRNA CHARAKTERISTIKA DITIOKARBAMÁTOV KOVOV A ICH VPLYV NA VLASTNOSTI GUMÁRENSKÝCH ZMESÍ

D. Ondrušová[a], M. Pajtášová[a], E. Jóna[a], G. Rudinská[a], M. Koman[b], P. Šuri[c]

[a]Katedra chémie a technológie anorganických materiálov, Fakulta priemyselných technológii, Trenčianska Univerzita Alexandra Dubčeka, 020 01 Púchov, SK, ondrusova@fpt.tnuni.sk
[b]Katedra anorganickej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita, 812 37 Bratislava, SK
[c]Rubber Research Institute, Matador a. s., 020 32 Púchov, SK

Ditiokarbamáty kovov predstavujú skupinu zlúčenín, reprezentujúcu rozsiahle spektrum zaujímavých štruktúrnych typov z hľadiska kryštalografického výskumu a zároveň poskytujú širokú škálu priemyselného využitia. Sú známe ako vysokotlakové lubrikanty, fungicídy a v neposlednom rade sú používané v gumárenskom priemysle, kde zastávajú funkciu ultraurýchľovačov vulkanizácie gumárenských zmesí [1].

Prvá časť práce obsahuje výsledky kryštalografického výskumu z oblasti *N, N'*- disubstituovaných ditiokarbamátokomplexov kovov a pojednáva o vzťahoch medzi zložením a štruktúrnymi vlastnosťami skúmanej skupiny novopripravených komplexov s S-donorovými ligandmi typu: $M(epdtc)_n$, kde M = Co(III), Hg(II) a Pb(II); epdtc = *N*-etyl-*N*-fenylditiokarbamát, s homogénnou koordinačnou sférou $[MS_6]$. Štruktúrne parametre boli študované s použitím Monokryštálovej röntgenovej štruktúrnej analýzy.

$Co(epdtc)_3$ vykazuje oktaedrickú koordináciu centrálneho atómu Co. Koordinačné polyedre komplexov $Hg(epdtc)_2$ a $Pb(epdtc)_2$ vykazujú deformovanú tetragonálne pyramidálnu koordináciu centrálneho atómu [2].

Druhá časť práce sa zaoberá aplikáciou pripravených ditiokarbamátov do reálnych gumárenských zmesí a skúma možnosti ich využitia vo funkcii urýchľovačov. Pojednáva o vplyve skúmaných zlúčenín na kinetické parametre procesu vulkanizácie, hodnotené metodou Diferenciálnej termickej analýzy. Hlavný dôraz je kladený na skúmanie vplyvu nových *N*-etyl-*N*-fenylditiokarbamátov na vulkanizačné charakteristiky a fyzikálnomechanické vlastnosti reálnych gumárenských zmesí a vulkanizátov. Praktickým výstupom je návrh nového vulkanizačného systému s optimálnymi hodnotami reologických, reometrických a fyzikálnomechanických vlastností, s obsahom nového, kineticky najaktívnejšieho $Co(epdtc)_3$ [3, 4].

[1] Debnah S. Ch., Basu, D.K.: *KGK, 48,* 111 (1995).
[2] Ondrušová D., Pajtášová M., Jóna E., Koman M.: *Solid State Phenomena, 90-91*, 383, (2003).
[3] Ondrušová D., Jóna E., Šimon P.: *J. Thermal Anal. and Cal., 67*, 147 (2002).
[4] Ondrušová D.: *Ditiokarbamáty kovov, ich štruktúrna charakteristika a vplyv na vlastnosti gumárenských zmesí.* Trenčianska univerzita A.D. Trenčín, ISBN 80-8075-037-8, (2004).

3Po64

ŠTÚDIUM ŠTRUKTÚRNYCH A SPEKTRÁLNYCH VLASTNOSTÍ KARBOXYLÁTOMEĎNATÝCH KOMPLEXOV S BENZTIAZOLOM

M. Pajtášová[a], D. Ondrušová[a], E. Jóna[a], M. Koman[b], V. Jorík[b]

[a]*Fakulta priemyselných technológii Púchov, TnU AD Trenčín, Katedra chémie a technológie anorganických materiálov, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov, SK, E-mail: pajtasova@fpt.tnuni.sk*
[b]*Fakulta chemickej a potravinárskej chémie STU Bratislava, Radlinského 9, 812 37Bratislava, SK*

Karboxylátokomplexy prechodných kovov majú uplatnenie v rôznych priemyselných oblastiach ako vysušovadlá náterových hmôt, aditíva do pohonných látok, látky proti korózii alebo promótory adhézie guma - kov [1, 2]. Ich benztiazolové adukty sa môžu uplatniť ako antibakteriálne kompozity, inhibítory endopeptidáz, ako urýchľovače sírnej vulkanizácie [3] a pod.

Pripravili sa štyri tetrakis(m-alkanoáto-O,O')dimeďnaté komplexy a štyri tetrakis(m-alkanoáto-O,O')-bis(benztiazol)dimeďnaté komplexy, s dlhým alkyl-uhľovodíkovým reťazcom, s počtom atómov uhlíka v reťazci 12, 14, 16 a 18.

Pripravené karboxylátomeďnaté komplexy tvoria polymérne reťazce, v ktorých sú navzájom viazané dimérne štruktúrne jednotky. Pri koordinácii benztiazolu sa polymérne reťazce menia na diskrétne centrosymetrické diméry. Rozdiely hodnôt symetrických a asymetrických valenčných vibrácii karboxylovej skupiny sú typické pre mostíkový typ koordinácie karboxylovej skupiny v konfigurácii *syn-syn*. Štiepenie v symetrickej vibrácii COO-skupiny pri benztiazolových aduktoch je spôsobené zmenou typu koordinácie karboxylovej skupiny z tridentátneho typu na bidentátny mostíkový typ. Elektrónové spektrá sú typické pre dimérne karboxyláty typu monohydrát octanu meďnatého.

Vyriešila sa molekulová a kryštálová štruktúra N,Nī-dicyklohexylbenztiazol-2- sulfénamidu, ktorý kryštalizuje v monoklinickej sústave s priestorovou grupou $P2_1/n$. Rozloženie atómov okolo stredového atómu dusíka N(2) sa blíži k rovnostrannému trojuholníku, ale atóm dusíka N(2) je vysunutý z roviny C(8), C(14), S(2), čo naznačuje tvar trigonálnej pyramídy.

[1] W. J. van Ooij, *Rubber Chem. and Technol., 57,* 421, (1984)
[2] M. Pajtášová, D. Ondrušová, E. Jóna, Š. Ďuriš, P. Šimon, *Plasty a kaučuk, 35*, 103, (1998)
[3] M.H.S. Gradwell, W.J. McGill, *J. Appl.Polym.Scien., 61*, 1131, (1996)

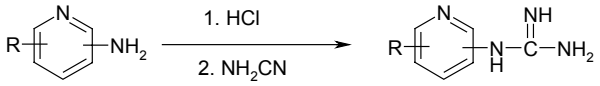
3Po65

SUBSTITUTED PYRIDYLGUANIDINES. SYNTHESIS AND ANTIFUNGAL ACTIVITY

Karel Palát [a], Gabriela Braunerová[a], Miroslav Miletín[b], Vladimír Buchta[c]

[a]*Department of Inorganic and Organic Chemistry, Faculty of Pharmacy, Charles University, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, Czech Republic, E-mail: palat@faf.cuni.cz*
[b]*Department of Medicinal Chemistry and Drug Control, Faculty of Pharmacy, Charles University, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, Czech Republic;*
[c]*Department of Biological and Medical Sciences, Faculty of Pharmacy, Charles University, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, Czech Republic*

A series of substituted pyridylguanidines was synthesized (see Scheme I) and its antimicrobial activity was evaluated in vitro against eight potentially pathogenic strains of fungi: *Candida albicans, Candida tropicalis, Candida krusei, Candida glabrata, Trichosporon beigelii, Trichophyton mentagrophytes, Aspergillus fumigatus, Absidia corymbifera.*



R = alkylsulfanyl, chloro, bromo

Scheme I

The compounds are high effective against tested strains of fungi. Particularly, the efficacy of some of them can be compared with that showed ketoconazole and dodine, used

as reference compounds for the inhibitory activity against fungi.

Acknowledgements. This work was supported by the project No. MSM0021620822 of the Ministry of Education of the Czech Republic, and by the grant of the Grant Agency of the Czech republic No. 203/04/0178.

[1] R. H. McKee, *Am. Chem. J., 26,* 209 (1901)
[2] K. Palát, M. Čeladník, J. Daněk, Š. Varkonda, *Collect. Czech. Chem. Commun., 57*, 1127, (1992)
[3] G. Braunerová, V. Buchta, L. Silva, J. Kuneš, K. Palát, *Farmaco, 59*, 443 (2004)

3Po66

ENDOCYCLIC SELENINAMIDES A NEW CLASS OF STABLE CHIRAL SELENIUM COMPOUNDS

J. Palus[a], M. Chojnacka[a], K. Kloc[a], A. Kumka[a], I. Mossakowska[b], G. Wójcik[b], J. Młochowski[a]

[a]*Departament of Organic Chemistry, Wrocław University of Technology*
[b]*Institute of Theoretical and Physical Chemistry, Wrocław University of Technology*
E-mail: jerzy.palus@pwr.wroc.pl

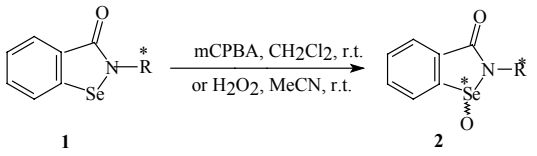
Chiral selenides and diselenides having stereogenic centers on the carbon atoms have been known as catalysts and reagents in asymmetric synthesis [1].

But only a few compounds with stereogenic center localized on selenium atom have been reported recently and they are known as unstable compounds [2,3].

In this work new analogues of mono- and bisbenzisoselenenazol-3(2H)-ones **1** with chiral substituents derived from camphor, chiral amines and α-aminoacids were stereoselectively oxidized on selenium atom to stable seleninamides **2**.

Absolute configuration of new generated on selenium atom asymmetric center in compounds 2 were determined by using X-ray crystallography analysis.

The relations between structure of starting compounds and stereochemical effect of the oxidation were discussed.



This work was supported by grant KBN 3T09A 00327.

[1] T. Wirth, *Tetrahedron 55*, 1, (1999)
[2] Y. Nakashima et al., *J.Org.Chem., 70*, 868, (2005)
[3] T. Shimizu et al., *J.Chem.Soc., Perkin Trans. 1*, 2151, (2002)

3Po67

SYNTÉZA 2-FENYL-4-(SUBST. AMINOMETHYL)-1*H*-IMIDAZOLŮ

Patrik Pařík, Martin Mansfeld, Miroslav Ludwig

Katedra organické chemie, Fakulta organické chemie, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, CZ - 532 10 Pardubice,
E-mail: Patrik.Parik@upce.cz, Miroslav.Ludwig@upce.cz

V rámci studia syntézy a vlastností derivátů 2-fenyl-1*H*-imidazolu jako potenciálních ligandů pro katalyzátory enantioselektivních syntéz byly jako modelové látky vybrány 2-fenyl-4-(subst.amino-methyl)-1*H*-imidazoly. V nich je strukturní segment „subst.amino“ reprezentován esterem α–aminokyseliny.

Reakcí ethyl-benzimidátu hydrochloridu s 1,3-dihydroxyacetonem byl připraven 2-fenyl-4-hydroxymethyl-1*H*-imidazol [1][2], který reakcí s thionylchloridem poskytl 4-chlormethyl-2-fenylimidazol. Ten byl neúspěšně podroben nukleofilní substituci s methyl-2-aminopropanoátem s cílem získat N-substituovaný ester aminokyseliny. Reakci se nepodařilo realizovat ani při nahrazení atomu chloru ve výchozím substrátu lépe odstupujícími skupinami OTf a OTos. Bylo naopak zjištěno, že v prostředí methanolu vzniká 2-fenyl-4-methoxymethyl-1*H*-imidazol a v prostředí ethanolu 4-ethoxymethyl-2-fenyl-1*H*-imidazol.

Byla tedy navržena jiná reakční cesta vedoucí k „*N*-[(2-fenylimidazol-4-yl)methyl]amino- kyselinám“ přes iminy. 2-fenyl-4-hydroxymethyl-1*H*-imidazol byl úspěšně oxidován na příslušný 2-fenyl-1*H*-imidazol-4-karbaldehyd kyselinou dusičnou [2][3] nebo oxidem manganičitým [4]. Takto připravený aldehyd byl podroben kondenzacím s deriváty a-aminokyselin: reakce s methylesterem kyseliny 2-aminopropanové neposkytla požadovaný imin, avšak úspěšně byla realizována kondenzace se sodnou solí alaninu. Vzniklý imin byl pak redukován tetrahydridoboritanem sodným na žádaný amin, který byl následně okyselen a převeden reakcí s thionylchloridem v methanolu na methylester. Vedle soli alaninu byly testovány i reakce se solemi valinu, fenylalaninu, serinu a histidinu.

The autors thank the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic for financial support (project MSM0021627501).

[1] Dziuron P., Schunack W., *Arch. Pharm (Weinheim. Ger.), 306*, 347-350, (1973)
[2] Paul R., Menschik J., *J. Heterocycl. Chem., 16*, 277-282, (1979)
[3] Paul R., Brockman J. A, Hallett W. A., Hanifin J. W., Tarrant M. E., Torley L. W., Callahan F. M., Fabio P. F., Johnson B. D., Lenhard R. H., Schaub R. E., Wissner A., *J. Med. Chem., 28*, 1704-1716 (1985)
[4] Kelley J. L., Miller C. A., McLean E. W., *J. Med. Chem., 20*, 721-723 (1977)

3Po68

POLY[(9,9-DIHEXADECYLFLUORENE-2,7-DIYL)-1,4-PHENYLENE] AS NEW POLYMER MATERIAL FOR PHOTONIC DEVICES

P. Pavlačková, V. Cimrová, D. Výprachtický

Institute of Macromolecular Chemistry Academy of Sciences of the Czech Republic, Heyrovsky Sq. 2, 162 06 Prague 6, Czech Republic, E-mail: pavlacko@imc.cas.cz

The design and synthesis of light-emitting polymers have received attention in the recent decade following the discovery of electroluminescence (EL) in conjugated polymers [1] and the development of polymer light-emitting diodes (PLEDs) as a display technology. It is not only the low cost of production and the possibility to prepare large flexible displays that makes EL polymers so attractive, but also the possibility to prepare a wide variety of chemical structures. However, blue luminescent materials are still the most difficult to utilize. Efficient blue light emission has been observed for example in poly(*p*-phenylene)-based materials, poly(p-pyridine), polymers with phenylenevinylene segments in the main chain, oligophenylene copolymers, polyquinoline or polyfluorene.

Poly[(9,9-dihexadecylfluorene-2,7-diyl)-1,4-phenylene] (PDFP) were synthesized via Suzuki coupling. Polymer was characterized by means of GPC, ^{1}H NMR and FTIR spectroscopies. Photophysical properties, photostability, and photoluminescence of this material in thin films and in solution were studied. Thin polymer films were spin-coated from tetrahydrofuran solution. An intensive blue PL emission was observed with a maximum at 410 nm.

Acknowledgements: We would like to acknowledge support of the Grant Agency of the Academy of Sciences of the Czech Republic (grant IAA4050409), and the Grant Agency of the Czech Republic (grant 203/04/1372).

[1] J.H. Burroughes, D.D.C. Bradley, A.R. Brown, R.N. Marks, K. Mackey, R.H. Friend, P.L. Burn, A.B. Holmes *Nature, 347*, 539 (1990)

3Po69

PREPARATION AND STUDY OF THE STRUCTURE OF 5-ARYLDIAZENYL-2,1,3-BOROXAZINES

Markéta Pešková[1], Petr Šimůnek[1], Valerio Bertolasi[2], Antonín Lyčka[3], Vladimír Macháček[1]

[1]University of Pardubice, Department of Organic Chemistry, Pardubice, Czech Republic, E-mail: marketa.peskova@upce.cz
[2]Universita di Ferrara, Dipartimento di Chimica and Centro di Strutturistica Diffrattometrica, Ferrara, Italy
[3]Research Institute for Organic Syntheses (VUOS), Rybitví 296, Pardubice 20, Czech Republic

Preparation of some pyridazinium salts using azo coupling reaction of β-enaminones with 4-subst. benzenediazonium tetrafluoroborates was published in paper[1,2]. 4-Subst. benzenediazonium hexafluorophosphates[2,3] gave also pyridazinium salts even at higher yields under analogous reaction conditions. In order to synthesize these salts with different anions, we prepared 4-methoxybenzenediazonium tetraphenylborate. Azo coupling reaction of this diazonium salt with 3-methylamino-1-phenylbut-2-en-1-one gave boroxazine as the major product.

We prepared the other boroxazines with variously substituted amino groups and with various substituents on aryldiazenyl group. The structures of prepared boroxazines were studied using X-ray diffraction and multinuclear magnetic resonance. At present, we are studying reaction mechanism of boroxazine heterocycles formation.

This work was supported by Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (Project MSM0021627501).

[1] Šimůnek P., Pešková M., Bertolasi V., Macháček V., Lyčka A: *Eur. J. Org. Chem.* 5055-5063, (2004).
[2] Šimůnek P.: *short communication,* 57. zjazd chemických spoločností, 4.-8. September 2005, Vysoké Tatry.
[3] Šimůnek P., Pešková M., Bertolasi V., Macháček V., Lyčka A: *Tetrahedron* submitted, (2005).

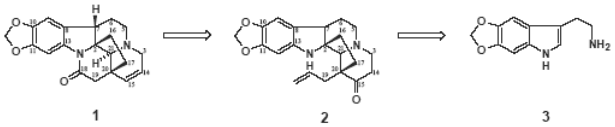
3Po70

TOWARDS SCHIZOZYGINE: SYNTHESIS OF ADVANCED INTERMEDIATES

Tomáš Pilarčík, Josef Hájíček

Zentiva Research Institute of Pharmacy and Biochemistry, U Kabelovny 130, 10237 Praha 10, E-mail: tomas.pilarcik@zentiva.cz

Schizozyganes constitute a small group of post-secodine hexacyclic alkaloids known for more than 40 years. They were isolated almost exclusively from African monotypic shrub *Schizozygia coffaeoides* (Boj.) Baill.[1]. This plant is used for ages as traditional medicine for treatment of various skin diseases. The extracts from the leaves showed high antifungal and antimicrobial activity[2]. As a part of our projected total synthesis of schizozygine **(1)** we describe here a biomimetic-like total synthesis of advanced seco-schizozygane intermediate **(2)** from methylenedioxytryptamine **(3)**[3].



[1] Renner U., Kernweisz, P., *Experientia, 19*, 244 - 246, (1963)
[2] Kariba R.M., Houghton, P.J., Yenesew, A., *J. Nat. Prod., 65*, 566 - 569, (2002)
[3] Adlerová E., Ernest I., Hněvsová V., Jílek J.O., Novák L., Pomykáček J., Rajšner M., Sova, J. Vejdělek, Z. *J. Protiva M. Collect. Czech. Chem. Commun. 25*, 784 - 795, (1960)

3Po71

VPLYV MORFOLOGICKÝCH VLASTNOSTÍ ŠKROBU NA TERMOOXIDAČNÚ STABILITU ŠTUDOVANÚ CHEMILUMINISCENCIOU

M. Pleteníková, L. Matisová-Rychlá, J. Rychlý

Ústav Polymérov, Centrum Excelentnosti pre Degradáciu Biopolymérov, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovenská Republika,
e-mail: upolmata@savba.sk

Škrob patrí medzi najrozšírenejšie látky v rastlinnej ríši. Je zložený z lineárnej amylózy, v ktorej sú glukopyranózové jednotky spojené (1-4)-α-D väzbami a rozvetveného amylopektínu, ktorý je spojený väzbami (1-4)-α-D a vetvenia sú napojené väzbami (1-6)-α-D.

Zloženie, morfológia, termická a termooxidačná stabilita sú ovplyvnené hlavne zdrojom škrobu.

Cereálne škroby (ryža, kukurica) majú nižšiu napučiavaciu schopnosť, rozpustnosť, vyšší obsah fosfolipidov v porovnaní so zemiakovým škrobom, ktorý obsahuje viac fosfátových monoesterov. Morfológia je ovplyvnená hlavne tvarom a veľkosťou granúl [1].

Granule zemiakového škrobu sú oválne, majú nepravidelný tvar a hladký povrch. Ich veľkosť je od 15 do 100 μm. Zrná kukuričného škrobu sú viachranné, ich rozmer je 25-26 μm. Ryžový škrob sa vyznačuje tým, že má najmenšie škrobové zrná (od 3 do 8 μm) a ich tvar je viachrannný. Často sa zhlukujú do cýst alebo majú zložitú štruktúru.

V tejto práci prezentujeme výsledky merania svetelnej emisie (chemiluminiscencie) škrobov podľa veľkosti častíc. Emisia viditeľného svetla, ktorá sprevádza tento proces, vyjadruje zvyškovú stabilitu škrobu. Na druhej strane, teplota a typ atmosféry (dusík alebo kyslík), morfologická charakteristika ako je veľkosť škrobových granúl, ich štruktúra a pomer koncentrácie dvoch hlavných zložiek škrobu - amylózy a amylopektínu - ovplyvňujú výslednú stabilitu škrobov.

CL merania boli uskutočnené na luminometri Lumipol 2 pri neizotermických podmienkach (v závislosti intenzity emitovaného svetla od teploty, rýchlosť ohrevu 2.5 °C/min) alebo izotermických podmienkach v kyslíku alebo v dusíku. Hmotnosť vzorky bola 4.5 mg a prietok plynu nad povrchom vzorky bol 3 l/h.

[1] Singh N., Singh J., Kaur L.: *Food Chemistry, 80, (2003)*

3Po72

EFFECT OF CHLORIDES IN COAL CHARGES ON RESULTANT COAL TAR MESOPHASE PROPERTIES

Eva Plevová[a], Věra Šugárková[b], Lenka Vaculíková[a]

[a]ÚGN AVČR, Studentská 1768, Ostrava - Poruba, 708 00, E-mail: plevova@ugn.cas.cz
[b]CPIT, VŠB- TU Ostrava, 17. listopadu 15, Ostrava - Poruba, 708 33

Current data corroborate assumptions that admixtures such as chlorides or other salts can influence processes of thermal degradation of coal. The employment of admixtures has been closely examined, in particular concerning possibilities of effecting poly-condensation reactions and final properties of carbonisation products [1].

In particular, Lewis acids and substances incorporating alkaline metals, and metals of alkaline earths ($ZnCl_2$, $MgCl_2$, $MoCl_5$, $FeCl_3$, etc.), which serve as catalysts of hydrocarbon dehydrogenation reaction, have been studied for this purpose [2].

This project investigated effects of chlorides in coal charge on obtained coal tar mesophase properties. Based on recent experiments, five chlorides, NaCl, $PbCl_2$, $ZnCl_2$, $CuCl_2$ and $AlCl_3$, were employed for the investigation. A precursor, which had been impregnated by 5% wt. concentration solutions of these substances, was carbonised to the temperature of 930 °C inside a special retort. From obtained coal tar, the mesophase was prepared under following conditions. The coal tar was brought to a temperature of 490°C with heating rate 0,7°C / min. inside of aluminium calottes.

Formed mesophase was immediately cooled in a cooling bath. Obtained mesophase was investigated by electron microscopy, thermal analysis and infrared spectroscopy. The resultant data indicated different rate in anisotropy as well as different anisotropic texture occurrence. Mesophase estimation showed distinct extensive mosaic, domain and laminated anisotropic texture occurrence after chloride addition, mainly NaCl and $CuCl_2$ addition. The differences in thermal behaviour and kinetic parameters of mesophase oxidation was determined too. The resultant data from microscopy analysis, thermal analysis and infrared spectroscopy well corresponded together.

A more detailed evaluation including screening and RTG analysis will be subject of further investigation.

[1] Ahmadpour A, Do D.D. *Carbon, 35*, 471-479 (1996)
[2] Boudou J.P. et al. *Carbon, 38*, 523-534 (2000)

3Po73

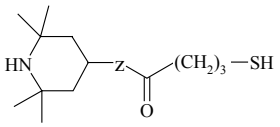
MODIFICATION AND THERMAL BEHAVIOUR OF LIQUID POLYBUTADIENES

Jana Kovářová, Jiří Podešva

Institute of Macromolecular Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, Heyrovský Sq 2, 162 06 Prague 6, Czech Republic

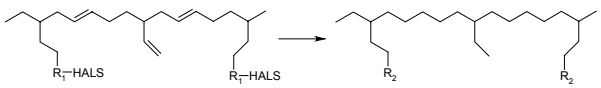
Low-molar-mass, OH-telechelic polybutadienes (liquid rubbers, LBH) exhibit rather low thermooxidative stability due to the presence of double bonds in their molecule. The aim of this work was to study the various possibilities of improving the stability of liquid rubbers via modification.

LBH has been partially hydrogenated to various degrees of conversion by two different methods, namely by gaseous hydrogen with Ziegler-Natta or Wilkinson catalysts and by diimide [1]. Additionally, to compare the effect of hydrogenation and that of the presence of stabilizing moieties on the chain, HALS-type compounds having the general formula (I):

(I)  (I)

where Z is either oxygen or NH group have been prepared [2] and added by the free-radical mechanism to the pending vinyls of the virgin LBH via sulphidic bridges and, alternatively, to the remaining pending vinyls of the partially hydrogenated LBH substrates.

The reverse procedure (that is, hydrogenation of the remaining C=C double bonds performed only after the structures (I) had been added) failed: both above mentioned methods were able to saturate the double bonds but, at the same time, they removed the active moiety (I) from the chain through hydrogenolysis, schematically:



where R_1 and R_2 are corresponding spacers.

In a second and more promising approach, a combined antioxidant/UV stabilizer based on LBH has been prepared. Its polybutadiene chain bears simultaneously HALS (I) and phenolic antioxidant (derived from Irganox 1076) structures in the amount of 7 mol.% and 4 mol.%, respectively, the latter being added also through -S- group [3].

Similarly, the remaining C=C bonds of HALS-bearing liquid rubbers were saturated via a free-radical addition of *t*-butylmercaptan. The newly synthesized products were characterized and the improvement of their thermo-oxidative stability was evaluated by means of thermoanalytical methods, DSC and TGA in air.

This contribution was supported by Grant Agency of the Czech Republic, grant No. 203/03/0617.

[1] J. Podešva, P. Holler, *J. Appl. Polym. Sci. 74*, 3203 (1999)
[2] J. Podešva, J. Kovářová, J. Spěváček, *Czech Patent Application,* PV 2004-1219
[3] J. Podešva, J. Kovářová, *J. Appl. Polym. Sci. 87*, 885 (2002)

3Po74

SYNTÉZA A CHARAKTERIZACE NOVÝCH KONJUGÁTŮ POLY(ETHYLENGLYKOLU) S DERIVÁTY SALICYLANILIDU

Martin Pravda[a], Lenka Kubicová[a], Miloš Sedlák[b]

[a]*Katedra anorganické a organické chemie, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Univerzita Karlova v Praze, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, Česká republika, E-mail: lenka.kubicova@faf.cuni.cz*
[b]*Katedra organické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice, Česká republika, E-mail: Milos.Sedlak@upce.cz*

V posledních dvou desetiletích významně stoupá výskyt těžkých systémových mykóz. Pro terapii těchto onemocnění je však k dispozici pouze malý počet klinicky použitelných antimykotik [1]. Výzkum se zaměřuje jak na hledání nových struktur antimykotik, tak i na strukturní modifikace již známých a používaných léčiv s cílem snížit toxicitu nebo zlepšit jejich farmakokinetické vlastnosti. Jedním ze způsobů, jak příznivě ovlivnit tyto vlastnosti, je příprava konjugátů biologicky aktivních látek s přírodními či syntetickými polymery, např. s poly(ethylenglykoly) [2].

Nedávno byla nalezena extrémně vysoká antimykotická aktivita thiosalicylanilidů in vitro proti vláknité houbě *Absidia corymbifera*, která patří mezi původce život ohrožujících systémových mukormykóz [3].

Cílem této práce bylo vypracovat metodiku syntézy konjugátů substituovaných salicylanilidů a thiosalicylanilidů s modifikovaným poly(ethylenglykolem) pomocí esterové vazby mezi fenolickou hydroxyskupinou v poloze 2 a karboxylovou funkcí nosiče.

Ze skupiny nedávno připravených antimykoticky aktivních thiosalicylanilidů [3] byly vybrány deriváty nejúčinnější proti *A. corymbifera* a jim odpovídající salicylanilidy. Jejich konjugáty s polymerním nosičem byly syntetizovány reakcí mPEG-COOH 5000 s využitím DCC jako dehydratačního činidla v prostředí dichlormethanu. Konjugáty byly charakterizovány pomocí NMR, IČ a UV spekter.

Práce byla podporována grantem FRVŠ 661/2005 a výzkumným záměrem MSM 0021620822.

[1] Pravda M., Kubicová L., Veselý O., Šustr M., Buchta V., *Folia Pharm. Univ. Carol., 31/32,* 67, (2004)
[2] Sedlák M., *Collect. Czech. Chem. Commun., 70,* 269, (2005)
[3] Kubicová L. *et al., ČR pat. přihl. PV 2005-337* (2005)

3Po75

BIOLOGICKÁ DEGRADACE AROMATICKO-ALIFATICKÝCH KOPOLYESTERŮ

Václav Šašek[a], Irena Prokopová[b], Jiří Vitásek[b], Josef Náhlík[b]

[a]*Mikrobiologický ústav, AV ČR, Vídeňská 1083, 142 20 Praha 4, Česká republika*
[b]*Ústav polymerů, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika, E-mail: irena.prokopova@vscht.cz*

Většina syntetických polymerů odolává účinkům mikroorganismů. S neustále stoupajícím objemem spotřeby polymerů se zvláště u výrobků s „krátkým životním cyklem“ stále zřetelněji ukazuje, že odolnost polymerů k vnějšímu prostředí, ceněná při aplikacích, se stává nevýhodou v okamžiku, kdy výrobek doslouží. Proto se v posledním desetiletí věnuje značná pozornost polymerům, jejichž chemická a fyzikální struktura dává předpoklad k jejich biodegradaci.

Zaměřili jsme se na testování biologické rozložitelnosti aromaticko-alifatických kopolyesterů, pro jejichž syntézu byl využit glykolyzát odpadního polyethylentereftalátu z použitých nápojových lahví a ε-kaprolaktonu [1]. Degradovatelnost kopolyesterů byla ověřována dvěma postupy: kompostovacím testem [2] a sledováním vlivu působení specifické extracelulární enzymatické aktivity ligninolytických hub. Kompostování jedné sady folií kopolyesterů bylo prováděno 6 týdnů, druhé pak 6 měsíců. Kopolyesterová vlákna byla vystavena účinku vybraných kmenů ligninolytických hub v agarovém médiu po dobu 3 měsíců. V obou případech byly zjištěny změny ve struktuře kopolyesterů vlivem působení aktivního biologického prostředí. Degradaci kopolyesterů potvrzuje pokles molární hmotnosti (GPC), příp. pokles redukované viskozity roztoků vzorků v porovnání se vzorky původními. Pomocí rastrovací elektronové mikroskopie bylo prokázáno narušení povrchu degradovaných fólií a vláken.

Bylo zjištěno, že při 60 °C, pH 7, dochází k hydrolýze studovaných aromaticko-alifatických kopolyesterů i v abiotickém prostředí.

Práce byla vypracována za podpory grantu GA ČR 203/03/0508.

[1] Vitásek J., Prokopová I., Tolar J., Šašek V., Náhlík J., *Zborník Polyméry 2004, Konference Polyméry 2004, Smolenice,* 140 (2004)
[2] Šašek V., Bhatt M., Cajthaml T., Malachová K., Lednická D., *Arch.Environ.Contamin.Toxicol., 44*, 336 (2003)

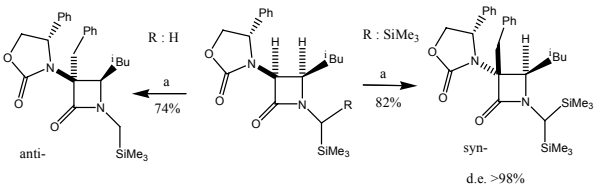
3Po76

SYNTHESIS OF TYPE-II β-TURN SURROGATE DIPEPTIDES BASED ON SYN α-AMINOα,β-DIALKYL-β-LACTAMS

Kinga Radwan-Pytlewska, Claudio Palomo, Jezus M.Aizpurua, Inaki Ganboa, Ana Benito, Maluca M. Fratila, Azucena Jimenez, Jose I. Iranda, Andreea Micle, Anthony Linden

Departamento de Química Orgánica-I .Universidad del País Vasco. Facultad de Química, Apdo 1072. 20080 San Sebastián, Spain

The achiral bis(trimethylsilyl)methyl group acts as an efficient stereochemical determinant of the α-alkylation reaction in β-branched α-phenyloxazolidinyl- or α-diphenyloxazolidinyl-β-lactams, providing the first stereo controlled access to syn- α-amino-α,β-dialkyl(aryl)-β-lactams. These products are readily transformed into the type II β-turn mimetic[1] surrogates 2B.



a. LDA, THF, -78ºC; then BnBr, -78→20ºC

[1] Kahn M.; Eguchi M. *Synthesis of Peptides Incorporating -Turn Inducers and Mimetics in Houben-Weyl, Methods of Organic Chemistry; Felix, A.; Moroder, L.; Toniolo, C. Eds.; Thieme: S*tuttgart-New York, 2003, vol. E22c, pp 695-740 and references therein.

3Po77

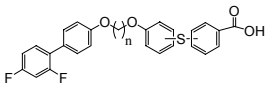
ANTILEUKOTRIENIKA S BIFENYLOVÝM FRAGMENTEM V LÉČBĚ ULCERATIVNÍ KOLITIDY

Robert Rödling[a], Antonín Jandera[b], Vladimíra Panajotová[b], Miloslav Kverka[c], Miroslav Kuchař[a]

[a]*VÚFB Zentiva, a.s., U kabelovny 130, 102 01 Praha 10, Czech Republic*
[b]*REaD-VÚFB, Ltd., Prague 9, 180 66 Czech Republic*
[c]*Institute of Microbiology, Academy of Sciences of CR, Prague 4, 142 00 Czech Republic*

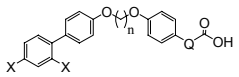
Leukotrieny (LT), vznikající z kyseliny arachidonové působením 5-lipooxygenasy (5-LO)[1], jsou důležitými mediátory zánětlivých procesů v organismu.[2] Bylo prokázáno, že při zánětlivém onemocnění střevního traktu, např. ulcerativní kolitidě (UC), se významně zvyšuje koncentrace LTB4 v postižené tkáni.[3] V souvislosti se syntezou antileukotrienik jako potenciálních léčiv alergických onemocnění respiračního ústrojí jsme připravili[4] rovněž deriváty I se strukturálním fragmentem

2,4-difluorbifenylu a prokázali jsme u nich signifikantní inhibiční účinek v oblasti UC vyvolané volnou solí dextran sulfátu.



I *(n = 3, 4)*

Ve skupině I jsme zjistili, že jejich účinnost v inhibici biosyntézy LTB4 klesá se stoupající lipofilitou. Pokračovali jsme proto syntézou substituovaných aryl alkanových kyselin II s předpokládanou nižší lipofilitou.



II

n = 2, 3, 4, X = H, F, Q = CH_2, $C(CH_3)_2$, $C(CH_2)_3$, $CH_2CH_2CH(CH_3)$

U studovaných sloučenin obecné struktury bifenyloxyalkoxyfenyloctové kyseliny byla obměněna: *i)* substituce bifenylu, *ii)* délka spojovacího řetězce, *iii)* substituce v alfa poloze ke karboxylu. Protizánětlivý účinek byl studován na modelu ušního zánětu, carrageeninového edemu, UC a z hlediska mechanismu účinku byla sledována inhibice biosyntézy LTB_4. Mezi látkami II bylo získáno několik derivátů s vyšší účinností v inhibici biosyntesy LTB_4 a současně řada těchto derivátů vykázala významný inhibiční účinek v testu UC. Regresní analýzou jsme zhodnotili zavislost inhibice biosyntézy LTB_4 na lipofilitě vyjádřenou jednak log P (log rozdělovacího koeficientu v systému oktanol-voda), jednak log k' (log kapacitního faktoru hodnoceným na RP HPLC). Prokázali jsme, že odvozený nelineární, parabolický vztah platí pro obě skupiny 2,4-difluorbifenylyl derivátů I a II. Parabolická závislost na lipofilitě současně prokázala, že dalšími změnami lipofility nelze v této skupině látek dále optimalizovat antileukotrienový efekt v inhibici biosyntézy LTB_4.

Tato práce byla podporována grantem MSMT ČR, č. LN 00B125.

[1] Taylor G.W., Clarke S.R.; *Trends Pharmacol. Sci 7*, 100 (1986)
[2] Brooks C.D. W., Summers J.B.; *J. Med. Chem. 39*, 2629 (1996)
[3] Singh V.P., Patil C. S., Kulkarni S K.: *Indian J.Exp.Biol. 42*, 667 (2004)
[4] Kuchar M., Kmoníček V., Panajotová V., Jandera A., Brůnová B., Junek R., Bucharová V., Čejka J., Šatínský D.: *Coll. Czech Chem. Commun. 69*, 2098 (2004)

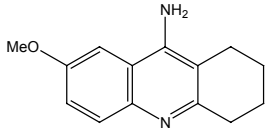
3Po78

SYNTÉZA REAKTIVÁTORŮ A INHIBITORŮ ACETYLCHOLINESTERÁZY VYCHÁZEJÍCÍ Z 7-METHOXYTAKRINU

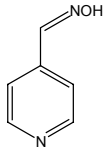
Martina Rozsypalová, Milan Potáček

Katedra organické chemie,Masarykova Univerzita v Brně, Kotlářská 2, 61137 Brno, Česká Republika,
E-mail: martina.rozsypalova@email.cz

Acetylcholinesteráza (AChE) je enzym, který v organismu rozkládá neurotransmiter acetylcholin. Pokud je AChE inhibována, dojde k nahromadění acetylcholinu na synapsích nervového systému. Jako ireverzibilní inhibitory AChE působí organofosforové sloučeniny, které jsou užívány v zemědělství (pesticidy), v průmyslu (změkčovadla), nebo jako bojové chemické látky (sarin, soman či tabun). AChE inhibují tak, že fosforylují respektive fosfonylují serinovou hydroxy skupinu v jejím aktivním centru [1]. Jako reaktivátory AChE se užívají sloučeniny, které obsahují aldoximovou skupinu. Dalším společným znakem používaných antidot je jedno nebo dvě kvartérní pyridiniová jádra [2]. V této práci vycházíme ze zmíněných poznatků a zároveň jako nový prvek přinášíme využití 7-methoxytakrinu. Projekt se věnuje vývoji potenciálních reaktivátorů, které by byly schopny reaktivovat AChE inhibovanou co nejširším spektrem organofosforových sloučenin a vychází se ze struktury 7-methoxytakrinu, Byla provedena modifikace struktury 7-methoxytakrinu (7-methoxytakrin byl nitrován a demethylací byl 7-methoxytakrin převeden na 7-hydroxytakrin). 7-Methoxytakrin a všechny jeho připravené deriváty byly navázány pomocí spojovacích řetězců na 4-hydroxyiminomethylpyridin. 7-Methoxytakrin se může vázat přes dusík zakomponovaný v cyklu nebo přes dusíky aminoskupin. Jako spojovací řetězce byly použity n-methylenové řetězce, kde n je 3, 4 a 6. Jedná se o naprosto nové sloučeniny, které budou dále podrobeny in vitro testům a v případě vysoké reaktivační schopnosti také in vivo testům.



7-methoxytacrine



4-hydroxyiminomethylpyridine

[1] Marrs, T. C., Pharmacol. Ther., 58, 51, (1993)
[2] Kassa, J., J. Toxicol. Clin. Toxicol., 40, 803-816, (2002)

3Po79

APPLICATION OF FT-IR SPECTROSCOPY IN ANALYSIS OF POLYSACCHARIDE FATTY ACID ESTERS

V. Sasinková[1], I. Sroková[2], Z. Hromádková[1], A. Ebringerová[1]

[1]Center of Excellence of the Slovak Academy of Sciences, Institute of Chemistry, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovak Republic
[2]Faculty of Industrial Technologies TnU of A. Dubček, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov, Slovak Republic, E-mail: chemsasi@savba.sk

In the course of studies on synthesis of polysaccharide derivatives functional group analysis plays an essential role. FT-IR spectroscopy, which has been recently recognised as a very useful tool in identification of polysaccharide types [1], represents also a very fast method to detect substituents introduced by modification, such as ester groups [2], etc. For quantitative analysis, various FT-IR techniques have been elaborated [3] based on calibration with standards of known functional group content, determined by direct analytical methods. Problems occur at very low degrees of substitution or in cases, when similar functional groups are native to the parent polysaccharide.

The aim of the present study was to evaluate the applicability of FT-IR spectroscopy in characterisation of fatty acid esters of various polysaccharide types from the viewpoint of qualitative and semiquantitative analysis. For this purposes, several series of fatty acid derivatives of HEC, CMS, and 4-O-methylglucuronoxylan have been prepared. The chemical modification was characterized by changes in the region of ester carbonyl stretching as well as O-H stretching, and the results were discussed in terms of their mutual relations.

The results indicated that FT-IR spectroscopy can be used to characterize the extent of esterification and, indirectly, the accessibility of hydroxyl groups affected by hydrogen bond system of the parent polysaccharide.

Acknowledgements. This work was financially supported by the Slovak Grant Agency VEGA, project No. 2/3162/23 and the Agency for Support of Science and Technique, project APVT-51-015802.

[1] Kačuráková, M. & Wilson, R. H., *Carbohydr.Polym., 44*, 291-303, (2001).
[2] Chatjigakis, A. K., Pappas, C., Proxenia, N., Kalantzi, O., Rodis, P., Polissiou, M., *Carbohydr. Polym., 12*, 71-81, (1998).
[3] Pappas, C. S., Malovíková, A., Hromádková, Z., Tarantilis, P. A., Ebringerová, A., Polissiou, M. G., *Carbohydr. Polym., 56,* 465- 469, (2004).

3Po80

PRÍPRAVA A REAKTIVITA DERIVÁTOV 2-HYDROXYTETRAL-1-ÓNU

Boris Gášpár[a], Daniel Žatko[a], Vladislav Semak[a], Adela Bílešová[a], Ivonig Duchéne[b], Marta Sališová[a], Andrej Boháč[a]

[a]Katedra organickej chémie, Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského v Bratislave, Mlynská dolina CH-2, 84215 Bratislava, E-mail: salisova@fns.uniba.sk
[b]ENSCCF-Université Blaise Pascal, Clermont Ferrand, 24, avenue des Landais -BP 187, 63174 Aubiére CEDEX, France

V našich predchádzajúcich prácach [1] sme potvrdili, že pri reakciách 2-hydroxy-2-metyltetralónu s α-aminokyselinami dochádza k ich epimerizácii na α-hlíku aminokyseliny (Schéma 1).

Rozhodli sme sa preskúmať a vysvetliť vplyv zmeny substituentov v polohe 2, 6 a 12 na priebeh a stereoselektivitu pozorovanej epimerizácie.

Závery:

a) porovnaním reaktivity a stereoselektivity kondenzácie a epimerizácie alanínu (Me-), valínu (^{i}Pr-), izoleucínu (^{sec}Bu-) a fenylalanínu ($PhCH_2$-) s 2-hydroxy-2-metyltetral-1-ónom sme zistili, že reakcie prebiehajú vo všetkých prípadoch analogicky, dochádza k epimerizácii na pôvodnom α-uhlíku aminokyseliny v heterocykle a *anti*-derivát je vždy majoritným diastereoizomérom v reakčnej zmesi.

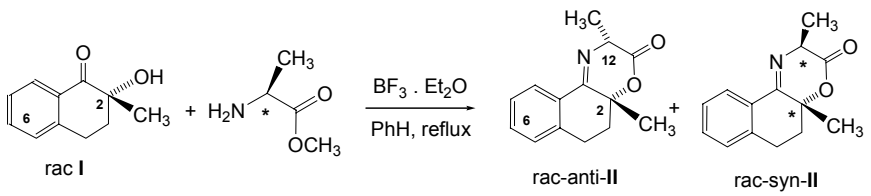
b) elektrónodorný substituent (MeO-) zavedený do polohy 6 nepreukázal výrazný vplyv na priebeh epimerizácie. Vo výskume sa pokračuje. Do polohy 6 zavádzame elektorónakceptornú NO_2 skupinu.

c) zámenou metylovej skupiny v polohe 2 objemnejším substituentom sa selektivita epimerizácii nezlepšila. Pozorovali sme jej mierne zhoršenie (z 89/11 pre metyl na 87/13 (alyl), 81/19 (^{i}Pr), 78/12 (Et)). Za toto neočakávané zhoršenie selektivity je pravdepodobne zodpovedná zmena konformácie heterocyklického kruhu vynútená práve prítomnosťou objemnejšieho substituenta. Momentálne pracujeme na kvantovochemických výpočtoch, ktoré by mali datailne vysvetliť konformačné zmeny a prispieť k racionálnym úvahám, ako dosiahnuť ovplyvnenie selektivity epimerizácie zmenou tetralínového skeletu.

Poďakovanie: Autori ďakujú Slovenskej grantovej agentúre za finančnú podporu grantu VEGA 1/0217/03 a Agentúre na podporu vedy a techniky za podporu na základe zmluvy č. APVT-20-031904.

[1] Solladie-Cavallo A., Šedý O., Sališová M., Schmitt M.: *Eur. J. Org. Chem.,17*, 3042, (2002)

Schéma 1 *89 / 11*



3Po81

SYNTÉZA A ANTIFUNGÁLNÍ AKTIVITA DIHYDROXYBENZANILIDŮ

Pavel Skála[a], Lenka Kubicová[a], Martin Pravda[a], Vladimír Buchta[b], Miloš Macháček[a]

[a]Katedra anorganické a organické chemie a
[b]Katedra biologických a lékařských věd, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Univerzita Karlova v Praze, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, Česká republika,E-mail: skalap@faf.cuni.cz

N-Substituované amidy a thioamidy hydroxybenzoových kyselin mohou projevovat různé biologické účinky, včetně antimykobakteriálního a antimykotického [1,2]. Většina biologických aktivit 2-hydroxybenzanilidů byla v posledních letech vysvětlena na molekulární úrovni. Tyto nové poznatky řadí 2-hydroxybenzanilidy a jejich analoga mezi základní modelové struktury pro vývoj nových léčiv.

Cílem této práce bylo připravit základní sérii dihydroxybenzanilidů s různými kombinacemi poloh hydroxyskupin v acylové části molekuly a studovat jejich antifungální aktivitu.

Dihydroxybenzanilidy byly připraveny jednostupňovou syntézou, která spočívala v reakci příslušné dihydroxykyseliny se substituovaným anilinem a chloridem fosforitým v chlorbenzenu v mikrovlnném reaktoru [3].

Sloučeniny byly testovány mikrodiluční bujonovou metodou celkem proti 8 kmenům potenciálně patogenních hub (dermatofyty, kvasinky aj.).

Práce byla podporována grantem GAUK 312/2005 B CH a výzkumným záměrem MŠMT MSM 0021620822.

[1] Kubicová L., Waisser K., *Česk. Slov. Farm., 41*, 208, (1992)
[2] Kubicová L., Šustr M., Pravda M., Waisser K., *Cent. Eur. J. Publ. Health, 12 Suppl.*, S57, (2004)
[3] Pravda M., Kubicová L., Skála P., *Chem. Listy, 98*, 1028, (2004)

3Po82

WASHING OF PULP FIBRES WITH AQUEOUS SOLUTIONS OF ANIONIC SURFACTANTS

Ida Skotnicová, František Potůček

Department of Wood, Pulp, and Paper, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice, Czech Republic, E-mail: ida.skotnicova@upce.cz, frantisek.potucek@upce.cz

Pulp washing is used industrially to remove spent pulping liquor from the pulp fibres. The aim of this work was to investigate both the mechanism of the displacement washing of unbeaten kraft pulp and the effect of the addition of anionic surfactants to the wash water on the washing efficiency.

Laboratory displacement washing experiments were performed in a glass cell under constant pulp bed height of 30 mm. Pulp beds the consistency of which was approximately 12.5 % were formed from a suspension unbleached kraft pulp fibres in black liquor. The degree of delignification of kraft pulp fibres was expressed by the kappa number having a value of 27.3. Distilled water and/or aqueous solutions of anionic surfactants, viz. Abeson, Spolapon 242, Spolapon 253, and Syntapon ABA, were used as the wash liquids at a temperature of 21 - 25 ^{o}C. The concentration of anionic surfactants was changed within the limits of 0.05 to 2.0 g∂dm^{-3}. A step response method was used to describe the displacement of black liquor from the pulp bed. The breakthrough curves were measured for alkali lignin using an ultraviolet spectrophotometer operating at a wavelength of 295 nm.

The breakthrough curves were described by the dispersion flow model containing one dimensionless criterion, known as the Peclet number. The traditional wash yield evaluated at the wash liquor ratio equal to unity was used as a standard basis of comparison of the various wash liquids. The dependence of the traditional wash yield upon the Peclet number obtained for wash water was expressed by the correlation equation. However, for aqueous solutions of anionic surfactants, the two dimensionless numbers, namely the Peclet number and the criterion π which is proportional to the ratio of the viscous forces to the surface forces, must be taken into account in correlations.

Results obtained showed that the addition of anionic surfactants to the wash water had a positive effect on the washing efficiency. However, the washing efficiency is influenced not only by the presence of surfactants in the wash water, but also by a number of phenomena occurring in a porous medium, such as pore size distribution, different local porosity of bed, geometrical properties of fibres including their swelling, and others.

3Po83

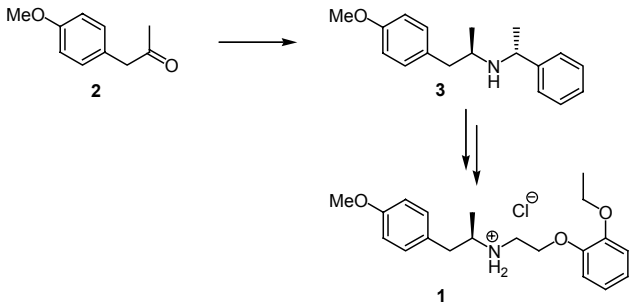
NOVÁ SYNTÉZA TAMSULOSINU A PŘÍPRAVA NEČISTOT

Markéta Slavíková, Josef Hájíček

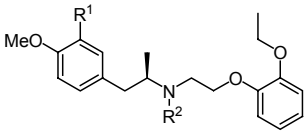
Zentiva Výzkumný ústav pro farmacii a biochemii, U Kabelovny 130, 10237 Praha 10, E-mail: Marketa.Slavikova@zentiva.cz; Josef.Hajicek@zentiva.cz;

Tamsulosin hydrochlorid patří do skupiny antagonistů adrenergních α_1-receptorů a je určen pro léčbu benigní hyperplasie prostaty a obtíží s tím spojených.

V tomto sdělení popisujeme novou syntézu[1,2] tamsulosinu **(1)**, tj. hydrochloridu (-)-(*R*)-5-[2-[[2-(2-ethoxyphenoxy)ethyl]-amino]propyl]-2-methoxybenzensulfonamidu. Syntéza vychází ze 4-methoxyphenylacetonu **(2)**, z kterého se v 6 reakčních stupních připraví tamsulosin ve velmi vysoké optické i chemické čistotě a v celkovém výtěžku 20%. Klíčovým stupněm pro konečnou optickou čistotu produktu je stereoselektivita reduktivní aminace v 1.stupni a vyčištění intermediátu **3**.



Dále bude diskutována příprava 2 nečistot tamsulosinu 4 a 5 a 2 rozkladných produktů 6 a 7.



4 $R^1 = SO_2NH_2$, $R^2 = Me$
5 $R^1 = SO_2NH_2$, $R^2 = CH_2CH_2OC_6H_4OEt$
6 $R^1 = R^2 = H$
7 $R^1 = SO_3H$, $R^2 = H$

[1] J. Hájíček, M. Slavíková: CZ 291802
[2] J. Hájíček, M. Slavíková: WO 03035608

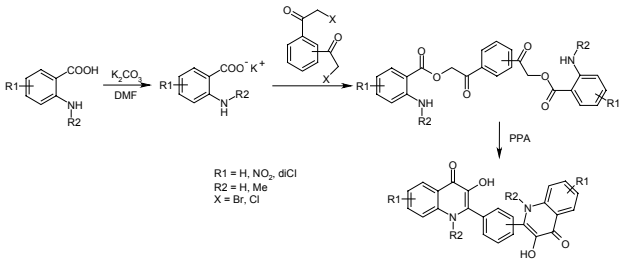
3Po84

SYNTÉZA A CYTOTOXICKÉ ÚČINKY VÍCEJADERNÝCH DERIVÁTŮ 3-HYDROXY-4(1*H*)CHINOLONU

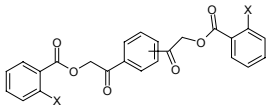
Miroslav Soural[1], Jan Hlaváč[1], Pavel Hradil[1], Marián Hajdůch[2]

[1]Katedra organické chemie Přírodovědecké fakulty Univerzity Palackého, Tř. Svobody 8, 77200 Olomouc, Česká republika, E-mail: souralm@seznam.cz
[2]Laboratoř experimentální medicíny Fakultní nemocnice, Oddělení pediatrie a onkologie, Lékařská fakulta Univerzity Palackého, Puškinova 6, 77520 Olomouc

Přestože celá řada derivátů 4-chinolonu je známa významnou biologickou aktivitou, vlastnosti 3-hydroxy-4(1*H*)chinolonů nebyly dosud až na výjimky sledovány, neboť existovaly pouze ojedinělé způsoby jejich přípravy. Nově objevený přesmyk [1] vedoucí k 2-substituovaným-3-hydroxy-4(1*H*)chinolonům umožnil podrobnější studium této oblasti. Isosternost 3-hydroxy-4(1*H*)chinolonů s flavony naznačuje možnou existenci cytotoxické aktivity. Jediná publikovaná práce zabývající se cytotoxicitou těchto derivátů danou hypotézu potvrzuje [2]. V naší práci jsme se zaměřili na dvoujaderé deriváty 3-hydroxy-4(1*H*)chinolonů.



Bis(halogenoacetyl)benzeny, tj. výchozí sloučeniny dvoujaderných derivátů 3-hydroxy-4(1*H*)chinolonů, byly dále využity k syntéze dvoujaderných α-halogenbenzoátů. Vzhledem k tomu, že vhodně substituované α-halogenbenzoáty byly již dříve testovány jako učinná tuberkulostatika [3], lze u níže uvedených derivátů rovněž očekávat inhibiční účinek na Mycobacterium tuberculosis.



X = F, Cl, Br, I, H

Testování cytotoxické aktivity vybraných derivátů 3-hydroxy-4(1*H*)chinolonů bylo realizováno *in vitro* na pěti nádorových buněčných liniích.

Projekt je podporován grantem MSM6198959216 Ministerstva školství, mládeže a sportu České republiky.

[1] Hradil P., Jirman J.: *Collect. Czech. Chem. Commun. 60*, 1357, (1995)
[2] P. Hradil, P. Krejčí, J. Hlaváč, I. Wiedermannová, A. Lyčka, V. Bertolasi: *J. Heterocyclic Chem. 41*, 375-379, (2004)
[3] Hradil P., Hlaváč J.,: *Patent PV 2002-3878*, applied in Prague 2002.

3Po85

SYNTÉZA NĚKTERÝCH DERIVÁTŮ 1,2,4-TRIAZINO[4,5-a]BENZIMIDAZOL-1-ONU

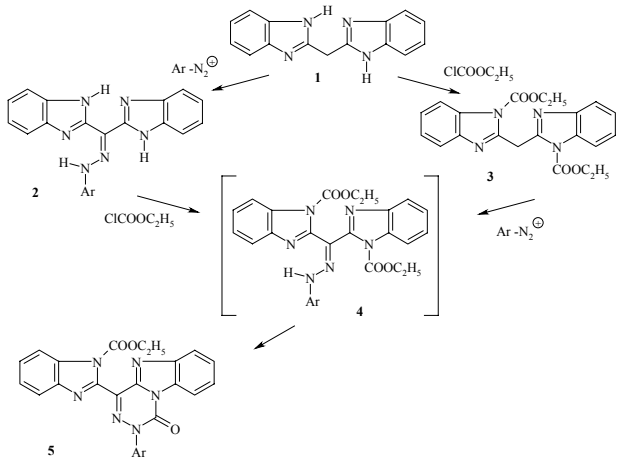
Jakub Stýskal[a], Libuše Stýskalová, Jan Slouka

Katedra organické chemie Přf UP, Tř. Svobody 8, 771 46 Olomouc,
E-mail: styskala@orgchem.upol.cz

Toto sdělení se týká syntézy nových derivátů 1,2,4-triazino[4,5-a]benzimidazol-1-onu, které jsou substituované dalším benzimidazolovým zbytkem.

Jako nejvýhodnější cesta vedoucí k těmto sloučeninám se nabízela cyklizační reakce arylhydrazonů odvozených od bis(benzimidazol-2-yl)methanu, kdy bylo využito poznatků týkajících se cyklizací N-arylkarbamátů obsahujících v sousední poloze azo- respektive tautomerní hydrazonovou skupinu. Touto metodou byla již připravena celá řada kondenzovaných 1,2,4-triazinů; např. s indolovým [1] nebo benzo[b]furanovým cyklem [2].

Kopulací diazoniových solí s bis(benzimidazol-2-yl)methanem **(1)** [3] byly připraveny odpovídající hydrazony **2**, které acylací chlormravenčanem ethylnatým a následnou cyklizací nestabilních hydrazono-karbamátů **4** poskytly 2-aryl-4-(1-ethoxykarbonyl-benzimidazol-2-yl)-1,2-dihydro-1,2,4-triazino[4,5-a]benzimidazol-1-ony **(5)**. Tyto sloučeniny byly získány také druhou cestou, kdy výchozí sloučenina **1** byla acylována chlormravenčanem ethylnatým za vzniku bis(1-ethoxykarbonyl-benzimidazol-2-yl)methanu **(3)**. Ten pak kopulací s diazoniovými solemi a následnou cyklizací poskytl žádané deriváty **5**.



Tato práce byla uskutečněna za finanční podpory výzkumného záměru MSM 6198959216.

[1] Slouka J., Bekárek V., Štemberk V.: *Collect. Czech. Chem. Commun., 43*, 960 (1978).
[2] Stýskala J., Slouka J., Hejsek M., Bekárek V.: *Collect. Czech. Chem. Commun., 62*, 1754 (1997).
[3] Lane E.S.: *J. Am. Chem. Soc. 75*, 2238 (1953).

3Po86

STUDIUM MECHANICKÝCH VLASTNOSTÍ EPOXIDOVÝCH PRYSKYŘIC MODIFIKOVANÝCH FUNKCIONALIZOVANÝMI AKRYLÁTOVÝMI KOPOLYMERY

Ladislav Svoboda, Jana Mísařová, Luboš Prokůpek, Jaromír Šňupárek

Univerzita Pardubice - ÚPM, Nám. Čs. Legií 565, Pardubice, E-mail: svoboda@upce.cz

Epoxidové pryskyřice (EP) jsou široce využívány v technické praxi pro jejich výborné vlastnosti jako jsou: vysoký modul pružnosti, pevnost v tahu a ohybu, elektrické vlastnosti, výborná adheze k různým povrchům aj. [1]. Hlavní nevýhodou EP je jejich křehkost. Z výše uvedených vlastností vyplývá i uplatnění epoxidů jako lepidel, licích pryskyřic pro elektrotechnický průmysl, nátěrových hmot a hlavně jako matric pro přípravu kompozitních materiálů.

Zvýšení rázové odolnosti lze docílit modifikací elastomerními aditivy, reaktivními i nereaktivními ředidly [2], tak pomocí polymerních funkcionalizovaných nanočástic na bázi methylmethakrylátu.

Pro přípravu nanokompozitních materiálů byly připraveny kopolymery methylmethakrylátu MMA, butylmethakrylátu BMA, glycidymethakrylátu GMA, kyseliny akrylové KA a allylmethakrylátu AMA pomocí semikontinuální emulzní polymerace. Připravené částice byly aplikovány do komerčních EP jak ve formě latexu, tak vysušené v rozprašovací sušárně. Nanokompozity byly připraveny homogenizací kopolymerů v epoxidové pryskyřici a vytvrzením epoxidových skupin pomocí polyaminů.

Na vytvrzených systémech byly studovány mechanické vlastnosti pomocí metod dynamické mechanické a termomechanické analýzy (DMA, TMA), rázové houževnatosti Charpy a tvrdosti dle Brinella. Struktura a homogenita systémů byla sledována pomocí skenovacího elektronového mikroskopu (SEM) a mikroskopií atomárních sil (AFM).

Z výsledků je patrný nárůst mechanických vlastností kompozitních materiálů, ale zároveň byla zjištěna nedostatečná homogennost systémů a separace fází ve struktuře vzorků.

[1] J. He, D. Raghavan, D. Hoffman, D. Hunston, *Polymer, 40*, 1923-1933 (1999)
[2] L. Prokupek, *Thesis, University of Pardubice* (1997)

3Po87

NOVÉ JEDNODUCHÉ LIGANDY PRO EXTRAKCI IONTŮ PŘECHODNÝCH KOVŮ

Eva Svobodová, Radek Cibulka, František Hampl, František Liška

Ústav organické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, E-mail: svobodoe@vscht.cz

V naší skupině byly již dříve připraveny tři série lipofilních ligandů obsahující 2-(hydroxyimino-methyl)pyridinové chelatotvorné seskupení, jejichž extrakční účinnost byla testována měřením jejich schopnosti transportovat ionty přechodných kovů (Cu^{2+}, Ni^{2+}, Co^{2+}, Pd^{2+}) přes chloroformovou kapalnou membránu (model BLM - *bulk liquid membrane*)[1]. Zjistili jsme, že rychlost transportu zvyšuje přítomnost kvartérní amoniové skupiny. Rychlost a selektivitu transportu rovněž ovlivňuje počet a délka hydrofóbních alkylových řetězců.

Připravené ligandy jsou velmi účinnými extraktanty, jejich širší použití však limituje jejich obtížná syntetická dostupnost a nízká stabilita. Proto jsme navrhli nové jednoduché ligandy obsahující podobné ligandové seskupení (obsahující stejné typy donorových atomů): 1-(dimethylamino)-2-hydroxyiminoalkany (**1**). Optimalizovaná syntéza oximů **1** vychází ze snadno dostupných 1-alkenů, které lze jednoduchou reakční sekvencí s vysokým celkovým preparativním výtěžkem transformovat na oximy **1**.

Účinnost nových ligandů **1** byla testována pomocí transportů přechodných kovů přes BLM. Ligandy **1** jsou účinnými extraktanty a lze předpokládat, že by mohly nalézt uplatnění v praktických aplikacích.

Autoři děkují Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy České republiky za finanční podporu projektu, grant číslo MSM 604 613 73 01.

[1] Svobodová E., Cibulka R., Hampl F., Šmidrkal J. and Liška F.: *Collect. Czech. Chem. Commun. 70*, 441-465, (2005)

3Po88

THE INFLUENCE OF ACIDITY ON THE POLYANILINE FILM FORMATION

I. Šeděnková, M. Trchová, E. N. Konyushenko, J. Stejskal

Institute of Macromolecular Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, 162 06 Prague 6, Czech Republic, E-mail:sedenko@imc.cas.cz

Polyaniline (PANI) [1] was chemically prepared by the oxidation by ammonium peroxydisulfate of aniline in aqueous medium of strong (sulfuric) or weak (acetic) acids and in aqueous medium without any added acid. The progress of polymerization was monitored in situ by FTIR spectroscopy after adding the solution of APS to the same amount of aniline solution placed on a ZnSe crystal [2]. The growth of PANI film at the crystal surface and differences in the growth connected with the presence of different acids are reflected in the spectra. It has been shown that in solution of sulfuric acid, granular PANI was produced, in solutions of acetic acid, PANI nanotubes were obtained. While in strong acid the induction period was followed by exothermic process, in weak acid, two exothermic processes proceed in succession. The hypothesis that the kinetics of polymerization is controlled by the acidity level and its changes during the polymerization, rather than by the chemical nature of an acid, has been tested.

[1] J. Stejskal, R.G. Gilbert, *Pure Appl. Chem. 74*, 857 (2002).
[2] M. Trchová, I. Šeděnková, J. Stejskal, *Synth. Met.*, in press.

3Po89

SYNTÉZA {2-[SUBST.(HYDROXY)METHYL]FENYL}-1H-IMIDAZOLŮ

Sylva Šenauerová, Patrik Pařík, Miroslav Ludwig

Katedra organické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice, Česká republika E-mail: Sylva.Senauerova@upce.cz, Patrik.Parik@upce.cz, Miroslav.Ludwig@upce.cz

Obsahem našeho studia je zkoumání možností syntézy derivátů 2-fenyl-1*H*-imidazolu jako ligandů pro tvorbu komplexů s kovy, jichž se následně využívá jako enantioselektivních katalyzátorů v asymetrických syntézách. Již v minulosti jsme syntetizovali různé 2-(2-subst.fenyl)-1*H*-imidazoly, ve kterých byly jako substituenty v o-poloze benzenového jádra využity alkoxy- a dialkylamino- skupiny.

Předmětem příspěvku je studium syntézy nových 2-(2-subst.fenyl)-1*H*-imidazolů, ve kterých jako substituent figuruje [alkyl(fenyl)(hydroxy)]methyl skupina. K získání uvedených „karbinolů“ byla zvolena reakční cesta využívající 2-(1*H*-imidazol-2-yl)benzofenon.

Reakcí 2-fenyl-1*H*-imidazolu s butyllithiem a následně s methyl-benzoátem byl připraven 5-fenyl-2,5-dihydro-3*H*-imidazo[2,1-*a*]isoindol-5-ol [1]. Tento derivát byl podroben dehydrataci s *p*-toluensulfonovou kyselinou za vzniku 5-fenyl-5*H*-imidazo[2,1-*a*]isoindolu [1]. Dále následovala oxidace kyslíkem na Pt/C za vzniku 2-(1*H*-imidazol-2-yl)benzofenonu [1]. Tento derivát byl podroben reakcím s různými Grignardovými činidly (alkylmagnesiumhalogenidy). Takto byly připraveny odpovídající různě substituované „karbinoly“, alkyl(fenyl)[2-(1*H*-imidazol-2-yl)fenyl]methanoly.

Jako alternativní cesta vedoucí k přípravě zmiňovaných „karbinolů“ byla paralelně testována reakce 2-fenyl-1*H*-imidazolu a 2-fenyl-1*H*-imidazolinu s butyllithiem následovaná kondenzací s různými karbonylovými sloučeninami.

Autoři děkují Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy České republiky za finanční podporu (Výzkumný záměr MSM 0021627501).

[1] Chaykovsky M., Benjamin R., Fryer R.I., Metlesics W., *J. Org. Chem., 35*, 1178-1180, (1970)

3Po90

FUNKČNÍ DERIVÁTY D-PENICILLAMINU JAKO INHIBITORY NÁDOROVÉHO RŮSTU

Alexandra Šilhánková[1], Filip Kielar[1], Miloš Chvapil[2], František Liška[1]

[1]Ústav organické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, E-mail: alexandra.silhankova@vscht.cz, frantisek.liska@vscht.cz
[2]Arizona Cancer Center and Department of Surgery, University of Arizona, Tuscon, AZ, USA, E-mail mchvapil@hotmail.com

D-Penicillamin, (DPA) - kyselina (*S*)-2-amino-3-methyl-3-sulfanylbutanová - patří mezi látky, které inhibují strukturální pevnost kolagenu a tím i řadu jeho funkcí, např. zabraňují růstu nových cév. Podstata jeho účinku spočívá mj. i v chelataci Cu^{2+} potřebných pro činnost proteinlysinoxidasy a s ní spojenou tvorbou kolagenu. DPA je však příliš hydrofilní a při jeho přímé aplikaci do nádoru působí jen krátkodobě, protože se z místa vpichu rychle vyplavuje tělními tekutinami. Proto jsme připravili řadu esterů a amidů s hydrofobním řetězcem ve funkční skupině DPA, které si zachovávají vlastnosti bidentátního ligandu s volnými SH a NH_2 skupinami schopnými koordinačně vázat Cu^{2+} z uvedeného enzymu. Jsou to estery obecného vzorce $(CH_3)_2C(SH)CH(NH_2)$-COOR (I), kde R = CH_3 (Ia), C_6H_{13} (Ib) a $PhCH_2$ (Ic) a amidy obecného vzorce $(CH_3)2C(SH)CH(NH_2)$-CONHR' (II), kde R'= C_6H_{13} (IIa), CH_2CH_2CN (IIb), $CH_2(Ph\ CH_2)COOH$ (IIc) a $CH(C(SH)(CH_3)_2COOH$ (IId). Všechny deriváty I a II byly isolovány a identifikovány ve formě odpovídajících hydrochloridů případně hydrobromidů. Uvedené látky se dávkují ve formě roztoku v hydrofilním polymeru do nádoru

a sleduje se růst a metastáze karcinomu prsu u potkanů. Zatímco při aplikaci DPA lze pozorovat jeho účinek po dobu hodin, při aplikaci lipofilnějšího Ib se účinek projevuje ještě po dvanácti dnech.

[1] Chvapil M.: *US Patent Appl.* 20050080132 (2005).
[2] Kielar F.: *Diplomová práce VŠCHT Praha*, 2004.

3Po91

KOMPATIBILIZACE SMĚSÍ PVC / PA12

Jan Šimek, Veronika Dočkalová, Radka Kalousková

Ústav polymerů, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6,
E-mail: Jan.Simek@VSCHT.cz

Práce se zabývala fyzikálními vlastnostmi a morfologií směsí PVC / PA 12. Jako možný kompatibilizátor byl využit chlorovaný polyethylen. Směsi míchané v tavenině byly testovány především za účelem zvýšení vrubové houževnatosti za použití technik DSC, DMTA, SEM a Charpyho kladiva. Bylo zjištěno, že binární směsi PVC / PA 12 jsou heterogenní a nemísitelné. Přídavkem chlorovaného polyethylenu lze významně zvýšit vrubovou houževnatost směsi.

Tato práce byla řešena jako součást výzkumného záměru MSM 6046137302.

3Po92

MIKROVLNAMI AKCELEROVANÉ AZA-CLAISENOVE PREŠMYKY ALYLTIOKYANÁTOV A ALYLAZIDOV ODVODENÝCH OD URIDÍNU

Monika Šoteková[a], Miroslava Martinková[a], Jozef Gonda[a], C. Oliver Kappe[b]

[a]*Univerzita P. J. Šafárika, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Katedra organickej chémie, Moyzesova 11, 041 67 Košice, Slovensko,*
E-mail: sotekova@gmail.com
[b]*Institute of Chemistry, Karl-Franzens University, Heinrichstrasse 28, Graz, Austria*

Od roku 1986, keď Gedye, Giguere a Majetich prvýkrát popísali využitie mikrovlnného žiarenia na syntetické účely [1, 2], vzrástol záujem organických chemikov o mikrovlnami-asistované reakcie. Podľa našich poznatkov dosiaľ neboli popísané syntézy branched-chain nukleozidov účinkom mikrovlnného žiarenia. Branched-chain nukleozidy predstavujú veľkú skupinu látok vykazujúcich vynikajúcu biologickú aktivitu. Medzi hlavných predstaviteľov tejto skupiny modifikovaných nukleozidov patria hlavne AZT, ECyd, EUrd, CNDAC, TSAO a jeho deriváty. Tieto zlúčeniny obsahujú vo svojej štruktúre zabudovaný heteroatóm alebo funkčnú skupinu v rôznych polohách sacharidovej časti, čo má za následok zmenu konfigurácie príslušného centra voči prírodnému nukleozidu, a následne nepriaznivý vplyv na funkciu nukleových kyselín. Tento fakt je využívaný pri inhibícii syntézy virálnej RNA a tumorovej DNA. V tejto práci je popísaná stereoselektívna syntéza 2'-C a 3'-C-branched-chain nukleozidov odvodených od uridínu s využitím [3,3]-sigmatropného aza-Claisenovho prešmyku alyltiokyanátov [3] a alylazidov v podmienkach 1,2 a 1,3-asymetrickej indukcie, a štúdium týchto prešmykov v podmienkach mikrovlnného žiarenia. Porovnaním výsledkov získaných štúdiom príslušných prešmykov za konvenčných podmienok a mikrovlnami-asistovaných podmienok sa zistilo, že okrem skrátenia reakčných časov dochádza aj k výraznému zlepšeniu diastereoizomérnych pomerov novovznikajúcich izotiokyanátov a azidov. Taktiež bol sledovaný vplyv polarity rozpúšťadla na priebeh mikrovlnami akcelerovaných prešmykov.

Táto práca vznikla s podporou grantov: VEGA, č. 1/9246/02 a COST-STSM-D32-01165.

[1] R. Gedye, F. Smith, K. Westaway, H. Ali, L. Baldisera, *Tetrahedron Lett., 27*, 279-282, (1986)
[2] R. J. Giguere, T. L. Bray, S. M. Duncan, G. Majetich, *Tetrahedron Lett., 27,* 4945-4948, (1986)
[3] M. Martinková, J. Gonda, M. Šoteková, M. Buděšínský, I. Císařová, *Chem. Pap., 59*, 113-116, (2005)

3Po93

SYNTHESIS AND CYTOTOXIC ACTIVITY OF NEW SUBSTITUTED [1,2,4]TRIAZOLO[4,3-*c*]QUINAZOLINES

Špirková K.,[1] Stankovský Š.,[1] Jantová S.,[2] Ovádeková R.[2]

[1] *Department of Organic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology,*
[2] *Department of Biochemistry and Microbiology, Faculty of Chemical and Food Technology,*
Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK-81237 Bratislava, Slovak Republic;
e-mail: sona.jantova@stuba.sk

With the aim of obtaining new anticancer agents, a series of substituted [1,2,4]triazolo[4,3-*c*]quinazolines were prepared and examined for their cytotoxic properties on the selected microorganisms and human cancer cell line HeLa.

Quinazoline skeleton was built up of an open-chain precursor- amidinoyl isothiocyanate, which in thermal isomerisation furnished the corresponding (3*H*)quinazoline-4-thione. The subsequent treatment with hydrazine effected the conversion of thione to 6-chloro-4-hydrazino-2-morpholinoquinazoline. This in turn has been converted by reaction with aromatic aldehydes to the corresponding arylcarbaldehyde 4-quinazolylhydrazones-starting compounds for the oxidative cyclization, which leading to 3-aryl-9-chloro-5-morpholino[4,3-*c*]quinazolines.

The broadest antimicrobial activity was found with 5-morpholin-4-yl-3-(5-nitrothien-2-yl) [1,2,4]triazolo[4,3-*c*]quina-

zoline (NTCHMTQ) in concentration of 10 mg/1 *for B. subtilis*, 50 mg/l for *S. aureus* and 100 mg/l for *C. tropicalis*. The highest tested concentration of derivative caused 83.1 % growth inhibition of R. *nigricans*. The highest cytotoxic effect on the HeLa cells was induced also NTCHMTQ (IC_{50} = 5.88 mg/l, IC_{100} = 10 mg/l). mg/l, IC_{100} = 100 mg/l). Other tested [1,2,4]triazolo[4,3-*c*]quinazolines showed weak activity (IC_{100} > 100 mg/l). NTCHMTQ caused on HeLa cells different cytotoxic effects depending on concentration and time of influence. The cytotoxic concentrations of NTCHMTQ induced integrity damage of cytoplasmatic membrane - necrosis of cancer HeLa cells. NTCHMTQ at concentrations of 10 mg/l induced a delayed cytotoxic effect. While after the first 24 h of influence we monitored the increased cell number, in the next time intervals the decrease of cell number was found. The cytotoxic effect of NTCHMTQ at concentration of 1.0 mg/l for HeLa cells was directly proportional to the concentration and time of influence.

This study was supported by the Grant Agency for Science Research of the Ministry of education of the Slovak Republic, VEGA numbers 1/1173/04 and 1/0058/03; and projects APVT-20-007304.

3Po94

POLYPROPYLÉNOVÉ NETKANÉ TEXTÍLIE S ANTIMIKROBIÁLNYMI VLASTNOSŤAMI

Ľudmila Černáková[a], Mária Mikulášová[b], Katarína Štechová[a], Daniela Klimová[a], Ivan Hudec[a]

[a]*Katedra plastov a kaučuku,*
[b]*Katedra biochémie a mikrobiológie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita, Radlinského 9, 812 37 Bratislava,*
E-mail: ludmila.cernakova@stuba.sk

Polypropylénové netkané textílie nachádzajú široké uplatnenie vo viacerých priemyselných oblastiach. Zvláštnu skupinu tvoria zdravotnícke textílie a produkty určené na osobnú hygienu, u ktorých sa vyžaduje ich antimikrobiálna úprava, ktorá má zabezpečiť ochranu proti alergiám, infekciám a zápachom. Táto úprava má byť navyše trvanlivá a nemá zhoršovať iné vlastnosti textílií.

S narastajúcim dopytom po antimikrobiálnych textíliách púta pozornosť aj ako činidlo na finálnu úpravu vlákien prírodný polysacharid chitozán pre svoje vynikajúce vlastnosti ako je biokompatibilita, bidegradabilita, bioaktivita a netoxickosť. Hlavným nedostatkom jeho použitia v tejto oblasti pre povrchové aplikácie je neschopnosť vytvoriť dostatočne pevnú väzbu s textilnými vláknami.

Nové možnosti povrchovej modifikácie otvárajú plazmové technológie, pomocou ktorých je možné meniť fyzikálne i chemické vlastnosti povrchu zavedením rôznorodých polárnych skupín.

V práci bol na polypropylénové netkané textílie po ich aktivácii v plazme povrchovo naväzovaný chitozán. Zistilo sa, že takto upravené textílie majú antimikrobiálne vlastnosti proti štyrom baktériám a dvom kvasinkám.

3Po95

SURFACE MODIFICATION OF LIGNOCELLULOSICS

Katarína Štechová[a], Ľudmila Černáková[a], Viera Chrástová[a], Katarína Mikušová[a], Dušan Bakoš[a], Mirko Černák[b]

[a]*Slovak University of Technology, Faculty of Chemical and Food Technology, Department of Plastic and Rubber, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovak Republic,*
E-mail: katarina.stechova@stuba.sk
[b]*Comenius University, Institute of Physics, Mlynská dolina F2, 842 48 Bratislava, Slovak Republic*

The protection and preservation of historical paper-based materials as the carriers of cultural heritage present a serious problem for archives, libraries and museums. Paper become yellowish and loses its strength with time. Causes of paper deterioration may be internal (chemicals added during paper manufacturing process) and/or external which are influenced by environment. It has been determined that acidity is one of the primary causes of paper deterioration. Paper deacidification is the main concern of many research places.

Plasma treatment can be a new technology in the field of protection and conservation of paper documents. The main purpose of plasma surface treatment of fibers is to modify the chemical and physical structure of their surface layer, but without influencing fiber bulk mechanical properties. The main advantage of plasma in paper treatment is the dry nature of the process.

The aim of this work was the improvement of strength and flexibility of paper. Papers with alternatively without plasma activation were modified with natural polysaccharide chitosan. The influence of plasma surface activation of paper in combination with chitosan application was studied even after accelerated thermal ageing. Plasma treatment at atmospheric pressure in nitrogen atmosphere was used for the paper surface activation. The mechanical properties of modified papers and morphology of layers created on the surface were investigated. It was found out that plasma activation combined with chitosan modification has a positive effect on the mechanical properties of paper. Significant enhancement of folding endurance was determined even after accelerated ageing.

This work was supported by state program Project BOOK SK.

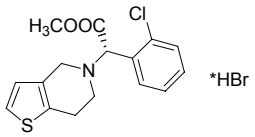
3Po96

CHARAKTERIZACE A VLASTNOSTI POLYMORFNÍCH FOREM KLOPIDOGRELU HYDROBROMIDU

Hana Štěpánková, Josef Hájíček, Hana Petříčková, Lucie Tisovská

Zentiva Výzkumný ústav pro farmacii a biochemii, U kabelovny 130, 102 37 Praha 10, E-mail: Hana.Stepankova@Zentiva.cz

Klopidogrel [1](1), chemicky (+)-(S)-methyl-2-(2-chlorfenyl)-(6,7-dihydro-4H-thieno-[3,2-c]pyrid-5-yl) acetát, působí proti shlukování krevních destiček a používá se při léčbě a prevenci trombóz, infarktu a arteroskleróz.



1

V lékové formě je používán ve formě farmaceuticky přijatelných solí, v originálním léčivu Plavix™ (Sanofi), se užívá ve formě hydrogensulfátu, který je znám v několika polymorfních formách[2,3]

V naší skupině jsme připravili dvě nové polymorfní formy klopidogrelu hydrobromidu, charakterizovali a porovnali jsme jejich fyzikální a chemické vlastnosti, vybrali vhodnou polymorfní formu pro lékovou formu. V našem posteru budou zmíněny i obtíže při výrobě vybrané polymorfní formy.

[1] EP 0099802 B1
[2] EP 281 459 (CZ 274 420)
[3] WO 03/051362

3Po97

STUDY OF ADHESIVE PROPERTIES OF POLYETHYLENE MODIFIED BY BARRIER AND RF - DISCHARGE PLASMA

Marián Števiar, Igor Novák, Ivan Chodák

Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 84236 Bratislava, Slovakia E-mail: upolstev@savba.sk

Due to low surface energy of low-density polyethylene (LDPE) its surface and adhesive properties are lower than is needed for bonding or printing. The advanced method of LDPE modification is based on pre-treatment of polymeric surface by electric discharge plasma [1]. The LDPE foils were modified using barrier and radio-frequency (RF) discharge plasma in various atmospheres at atmospheric pressure. The evaluation of surface and adhesive properties of modified LDPE led to the conclusion that the most significant increase of observed properties in comparison with unmodified polymer was reached after modification of polymer in O_2 plasma.

The research was supported by the Slovak Grant Agency VEGA (grant No. 2/4042/04).

[1] Mirabedini, S. M., Rahimi, H., Hamedifar, S., Mohseni, S. M., Intern. *J. Adhes. Adhesives, 24*, 163-170, (2004)
[2] Ráhel, J., Šimor, M., Černák, M., Štefečka, M., Imahori, Y., Kando, M., *Surf. Coat. Technol.* 169-170, 604-608, (2003)

3Po98

ORGANIC SEMICONDUCTORS INFLUENCED BY PHOTOCHROMIC TRANSFORMATION OF SPIROPYRAN DYE

Martin Vala[a], Martin Weiter[a], Karolína Černá[a], Stanislav Nešpůrek[a,b], Oldřich Zmeškal[a]

[a]Faculty of Chemistry, Brno University of Technology, Purkynova 118, 612 00, Brno, Czech Republic, E-mail;xcvala@fch.vutbr.cz
[b]Institute of Macromolecular Chemistry, Heyrovský Sq. 2, 162 06 Prague 6, Czech Republic

π-electron system has all the essential electronic features of organic semiconductors: light absorption and emission, charge generation, transport, and recombination. Introduction of switchable species, which strongly influence the π-electrons, can lead to fine modulation of optical and electrical attributes of these materials. This work deals with tuning of organic media using reversible light-driven switching of photochromic spiropyran. Spiropyran molecule can be reversibly converted to its less stable high dipole moment possessing merocyanine form by absorption of appropriate energy. The significant change of dipole moment's size allows construction of simple switching unit. Several types of device composition were designed - blend, multilayered, and combined. Optical responses were studied using absorbance and photoluminescence measurement, whereas electrical responses, conductivity and capacity particularly, were detected by impedance and direct current measurement. Reversible switching was observed using all the methods mentioned. It was found that the spiropyran's photochromic reaction is strongly influenced by energy transfer process between the semiconducting π-electron system and spiropyran. This provides further evidence for the capability of such species to be used as an active switching unit in the proposed devices.

This work was supported by the grant 3446/2005/G1 from the Development Fund of Universities.

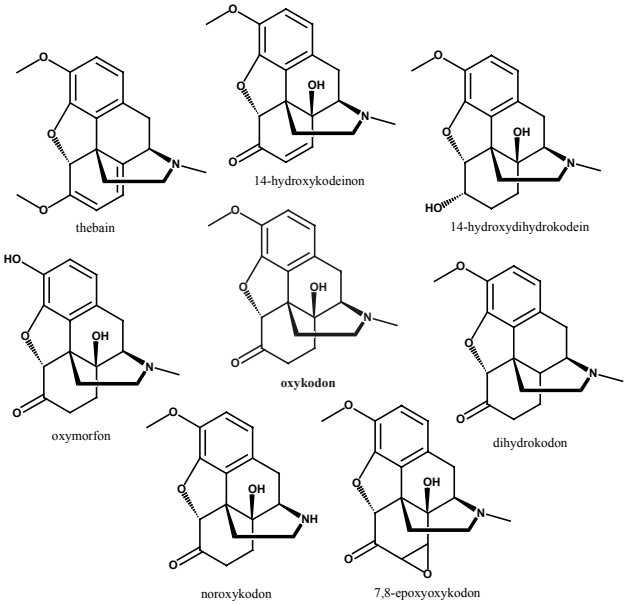
3Po99

NEČISTOTY PŘI VÝROBĚ OXYKODONU

Petr Velíšek, Josef Hájíček

Zentiva Výzkumný ústav pro farmacii a biochemii, Praha 10 - Dolní Měcholupy, U kabelovny 130, PSČ 102 37, E-mail: Petr.Velisek@zentiva.cz, Josef.Hajicek@zentiva.cz

Oxykodon patří mezi opiátová analgetika, odvozená od kodeinu, jehož 3-methoxyskupina snižuje návykovost. Při výrobě oxykodonu vzniká několik vedlejších produktů, jejichž příprava je předmětem tohoto příspěvku. Vedle thebainu a 14-hydroxykodeinonu, což jsou meziprodukty synthesy, se jedná o oxymorfon, 7,8-dihydro-14-hydroxykodein, noroxykodon, hydrokodon a 7,8-epoxyoxykodon.



oxykodon a jeho nečistoty

3Po100

SYNTHESIS AND PROPERTIES OF NEW ADAMANTANE-CONTAINING NITRO COMPOUNDS

Robert Vícha, Veronika Ježková, Anja Zierhut

Tomas Bata University in Zlín, Faculty of Technology, Department of Food Engineering and Chemistry, Nám. TGM 275, 760 01 Zlín,E-mail: rvicha@ft.utb.cz

Adamantane moiety introduced into the molecule of biologically active compound can significantly improve the properties of the resulting compounds. High lipophilic character of the adamantane cage increases the active compound permeability through the membranes and its availability in the target place. On the other hand presence of adamantane can overcome water solubility limitations of the original compounds by the complexation with cyclodextrines [1]. Formation of supramolecular complexes with proper stability is necessary in order to combine of these two advantages. For this purpose the convenient adamantane-containing building blocks with modulated polarity are needed.

We decided to prepare and examine properties of several anilines with 1-adamantyl substituent bound by alkyl chain bearing hydroxy or keto group in addition. The first part of this investigation is presented.

Adamantane-containing nitro compounds (see Fig.1) were prepared by nitration of corresponding ketones. These ketones were obtained by previously developed method [2] based on the reaction of appropriate acyl chlorides with Grignard reagent. Aluminum trichloride and copper chloride were used as a catalyst. The crude products of nitration contained usually all three isomers. Thus, these mixtures were analyzed by GC to determine yield of each isomer and subsequently isolated by LC. Conditions for both procedures are given as well as spectral characteristics of all the isolated compounds.

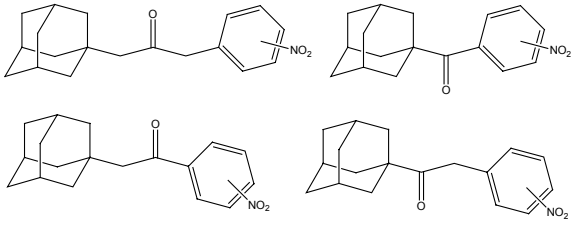


Fig. 1: Structures of the new prepared adamantane-containing nitro compounds

These studies were supported by the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (Grant No MSM7088352101).

[1] W.C. Cromwell, K. Byström, M. R. Efting, *J. Phys. Chem., 89*, 326-332 (1985)
[2] R. Vícha, M. Potáček, *Tetrahedron, 61*, 83-88 (2005)

3Po101

OTEVŘENÉ FORMY ANTITUBERKULOTICKY AKTIVNÍCH BENZOXAZOLŮ

J. Vinšová, Z. Oktábec

Farmaceutická fakulta UK, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, E-mail: vinsova@faf.cuni.cz

Zavedení *terc*-butylových skupin do molekuly benzoxazolů vede ke zvýšení lipofility a tím i snazší penetraci lipoidní mykobakteriální stěnou. Z námi připravené série 5,7-di-*terc*-butyl-benzoxazolů substituovaných v poloze 2 aromatickým substituentem vykázalo několik derivátů 100-90 % aktivitu v koncentraci 6,25 Ķg/ml vůči *Mycobacterium tuberculosis* $H_{37}Rv$[1,2]. Protože se benzoxazoly metabolicky pravděpodobně otevírají, je cílem tohoto příspěvku příprava substituovaných N-(3,5-di-*tert*-butyl-2-hydroxyphenyl)ben-zamidů a pyridinkarboxamidů, jejich

tzv. „otevřených forem“, které mohou být rovněž považovány za „převrácené salicylanilidy“, u nichž byla také nalezena významná antituberkulotická aktivita[2].

Syntéza analogů nejúčinnějších benzoxazolů vycházela z 2-amino-3,5-di-*terc*-butylfenolu, který byl připraven reakcí 3,5-di-*terc*-butyl-1,2-benzochinonu s amoniakem a následnou redukcí chinoniminu. Takto získaný aminofenol byl kondenzován s příslušnými aromatickými či heteroaromatickými kyselinami za přídavku PCl_3 v chlorbenzenu. Poměrně dlouhá reakční doba vedla ke zvyšování podílu barevných vedlejších produktů v neprospěch požadovaného produktu. Proto bylo přistoupeno k reakci v mikrovlnném reaktoru, který značně zkrátil dobu reakce z hodin na minuty. Jako vedlejší produkty byly vyizolovány též benzoxazoly, které díky své hydroxylové skupině světélkují pod UV 254 nm. Připravené anilidy byly převedeny reakcí s Lawessonovým činidlem na příslušné thioamidy, jejichž cyklizace vedla částečně též k benzothiazolům. U připravených N-(3,5-di-*tert*-butyl-2-hydroxyphenyl)amidů a jejich sirných analogů bude stanovena antituberkulózní aktivita a porovnána s předlohovými látkami.

Práce vznikla za finanční podpory grantu IGA MZ 1A/8238-3 a MSM 002162082.

[1] Vinšová J.: dosud nepublikované výsledky
[2] Vinšová J., Horák V., Buchta V., Kaustová J.: *Molecules 10*, 760-770, (2005)
[3] Waisser K. a kol.: *Arch. Pharm. Pharm. Med. Chem., 336*, 322-335, (2003)

3Po102

CHEMICKÁ MODIFIKACE ODPADNÍHO POLYETHYLENTEREFTALÁTU

Jiří Vitásek, Irena Prokopová, Miroslav Koudela

Ústav polymerů, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika, E-mail: jiri.vitasek@vscht.cz

Polyethylentereftalát (PETP) je velmi ceněný materiál, využívaný hlavně pro výrobu textilních vláken. V posledním desetiletí výrazně vzrostla spotřeba PETP v obalovém průmyslu, a to zejména na výrobu nápojových lahví. Ve srovnání s jinými plastovými výrobky mají obaly jen krátkou dobu života. Přispívají proto podstatnou měrou k neustále rostoucímu objemu plastového odpadu. Poměrně dobrá odolnost k povětrnostnímu stárnutí [1] a resistence k mikrobiálnímu ataku [2] jsou pro většinu aplikací PETP předností, z hlediska zneškodňování obalového odpadu to však jsou závažné nevýhody. Vedle dosud více využívané fyzikální recyklace PETP odpadu se rozvíjejí také snahy o jeho chemickou recyklaci.

Naším příspěvkem v tomto směru je využití glykolyzátu PETP z použitých nápojových lahví pro syntézu aromaticko-alifatických kopolyesterů obsahujících ε-kaprolaktonové strukturní jednotky. Podle ^{1}H NMR analýzy jsou připravené kopolyestery s obsahem 20 - 50 mol % zabudovaného ε-kaprolaktonu charakterizovány převážně statistickou distribucí aromatických a alifatických esterových jednotek v polymerních řetězcích. Termické i mechanické vlastnosti vybraných typů těchto kopolyesterů, v závislosti na jejich složení, dávají předpoklad jejich možného využití jako obaloviny. Bylo prokázáno, že tyto materiály mají sníženou odolnost k biodegradaci [3].

Práce byla vypracována za podpory grantu GA ČR 203/03/0508.

[1] B. Doležel, *Die Beständigkeit von Kunststoffen und Gummi*, Carl Hanser Verlag, München (1978) p.232
[2] Y. Tokiwa, T. Suzuki, *Nature, 270*, 76 (1977)
[3] V. Šašek, J. Vitásek, I. Prokopová, J. Náhlík, 57. zjazd chemických společnosti, Vysoké Tatry 2005, poster

3Po103

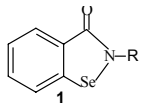
NEW ORGANOSELENIUM BIOLOGICAL RESPONSE MODIFIERS ACTIVE AGAINST PATHOGENIC VIRUSES, BACTERIA AND FUNGI

Halina Wójtowicz[a], Magdalena Piętka[a], Katarzyna Chodak[a], Piotr Kula[a], Wanda Peczyńska[a], Egbert Piasecki[b], Jacek Młochowski[a]

[a]*Department of Organic Chemistry, Faculty of Chemistry, Wrocław University of Technology, Wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław, Poland, E-mail: halina.wojtowicz@pwr.wroc.pl*
[b]*Institute of Immunology and Experimental Therapy, Polish Academy of Sciences, R. Weigla 12, 53-114 Wrocław, Poland*

It has been known that some organoselenium compounds such as 2-phenyl-1,2-benzisoselenazol-3(2H)-one (ebselen, 1a), its azaanalogues and 2,2'-disubstituted diphenyl diselenides exhibit high activity against bacteria, fungi and pathogenic viruses [1,2].

In this work we designed new 2-substituted benzisoselenazol-3(2H)-ones 1b-e and elaborated their synthesis, starting from 2-(choroseleno)benzoyl chloride, and tested them as antivirals against EMCV, HSV-1 and VSV *in vitro* as well as against selected Gram-positive, Gram-negative bacteria and fungi. Most of them exhibited appreciable antiviral and antimicrobial activity similar to activity of the common antibiotics (chloroamfenicol and ketoconazol).



1

R= **a**) Ph; **b**) H; **c**) $(CH_2)_nOH$, n=1-3; **d**) alkyl; **e**) $CHR^1CH(OR^2)_2$

[1] H. Wójtowicz, M. Chojnacka, J. Młochowski, J. Palus, L. Syper, D. Hudecova, M. Uher, E. Piasecki, M. Rybka, *Il Farmaco, 58,* 1235-4258, (2003)
[2] H. Wójtowicz, K. Kloc, I. Maliszewska, J. Młochowski, M. Piętka, E. Piasecki, *Il Farmaco, 59*, 863-68, (2004)

3Po104

STUDY OF COATINGS DISSOLUTION AND SOLUBILITY PARAMETERS

Lucie Wolfová

Institute of Physical and Applied Chemistry, Brno University of Technology,Purkyňova 118, 612 00 Brno, Czech Republic, E-mail: wolfova@fch.vutbr.cz

The subject of this study is mainly the impact of types and chemical structure of selected solvents on the degradation of selected coatings. Especially, it is focused on the impact of physical and chemical properties and chemical structures of selected solvents and paintfilms on their chemical degradation. Mainly it is concerned to the determination and study of solubility parameters of the solvents and their mixtures and of the paintfilms and to the projection of new solvents mixtures with well-performing option for the coating and graffiti removing, too.

The dissolution and solubility of paint film depend on a lot of attributes. From the therodynamic point of view, degree of solvent affinity to polymer is given by the Gibbīs energy change and the solubility is mainly determined by the enthalpy value ΔH_{mix}., which therethrough relates a change of internal energy during evaporation ΔH_{evp}. This value related to unit volume $\Delta H_{evp}/V$ is the density of cohesive energy $\Delta\varepsilon$. A root of this formula is mentioned the *solibility parameter* δ.

The smaller is the difference δ of solvent and polymer, the better should be dissolution. The polymers are mostly soluble in that solvents, which their $< \delta >$ correspond to middle interval of polymer solubility approximately to two units.

[1] Mleziva J., Šňupárek J.: Polymers - processing, structure, attributes and application, Prague 2000.
[2] Pouchlý J.: Physical chemistry of macromolecular and colloid systems, Prague 2001.

3Po105

STEREOSELEKTÍIVNE SYNTÉZY ANALÓGOV POLYOXINU C

Andrea Zadrosova, Jozef Gonda

Univerzita P. J. Šafárika, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Katedra organickej chémie, Moyzesova 11, 041 67 Košice, Slovensko, E-mail: zadrosova@pobox.sk

V roku 1963 sa začalo s novou sériou výskumov, v snahe získania nových antibiotík účinných proti plesni *Pellicularia filamentosa f. sasaki*, napadajúcej ryžu. K. Isono a kolektív čoskoro objavili a izolovali celú skupinu účinných polyoxínov neopolyoxínov a nikkomycínov, produkovaných baktériami *Streptomyces cacaoi* var. Asoensis [1]. Tieto látky našli široké použitie ako fungicídy bez vedľajších účinkov.Pri štúdiu štruktúry polyoxínov neopolyoxínov a nikkomycínov sa zistilo, že rozhodujúci vplyv na biologickú aktivitu má kofigurácia a-aminokyseliny v polohe C-5 u ribofuranózovom zvyšku. Pre biologickú účinnosť je nevyhnutná (S) konfigurácia. Pri syntéze aminosacharidových prekurzov týchto antibiotík sme sa rozhodli vyuzit (3,3) sigmatropny presmyk ako velmi uzitocnu metodu na vytvaranie noveho stereogenneho centra. Studovali sme presmyky alyltiokyanátov odvodených od D-ribózy ako i D-xylozy v roznych podmienkach a ich prevedenie na prislusne α-aminokyseliny zo želanou konfiguraciou. Pri prešmyku alyltiokyanátov na izotiokyanáty nás zaujímal vplyv konfigurácie a objemnosti substituentov v blízkosti reakčného centra na stereoselektivitu týchto reakcií.

[1] Hanessian S., Isono K. *Tetrahedron Lett., 34*, 4153-4155, (1993)

3Po106

TEPELNÁ VODIVOST SVRŠKOVÝCH OBUVNICKÝCH MATERIÁLŮ

Barbora Zachová, Radim Horák, Antonín Blaha, Petr Hlaváček

Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Fakulta technologická, Nám. TGM 275, 762 72 Zlí, E-mail: zachova@ft.utb.cz

Sdílení tepla je velmi důležitá vlastnost každého materiálu. V této práci je sdílení tepla charakterizováno tepelným odporem a následně tepelnou vodivostí.

Schopnost tepelné ochrany nohy je u obuvi má velký význam. Většina obuvi je vyráběna z přírodní či syntetické usně, jiných syntetických materiálů a textilu. Pro zjištění hodnot tepelné vodivosti obuvnických svrškových materiálů a pro srovnání vlastností materiálů byl měřen tepelný odpor nestacionární metodou. Pro tato měření byl použit přístroj zkonstruovaný podle Fitche. Část tohoto zařízení představují dvě vyhřívané desky, které se dotýkají měřeného vzorku a dodávají nebo odebírají teplo během měření nestacionárního transportu tepla přes měřený vzorek. Měřením se získává odhad efektivní tepelné vodivosti kompozitu v rozmezí počátečních teplot měřících desek.

Vzorky pro měření byly vyrobeny ze svrškových obuvnických materiálů různého původu i tloušťky. Byla sledována závislost typu materiálu (a u usní způsobu činění) na hodnotách tepelné vodivosti.

Rozdíly tepelné vodivosti mezi různými druhy usní a jinými svrškovými materiály jsou dost výrazné a stojí za zvážení při výběru vhodného materiálu pro daný druh obuvi a roční období.

Rozdíly tepelné vodivosti při různém druhu činění usní nevykazuje výrazné výkyvy. Takže činění se neukazuje jako kritické kritérium při výběru vhodného materiálu.

[1] Brzobohatý, *Měření tepelné a teplotní vodivosti polymerních materiálů* [Diplomová práce], Fakulta technologická, UTB Zlín, 2002.

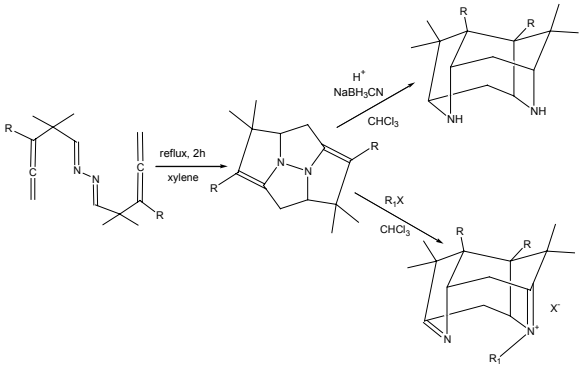
3Po107

PŘESMYK CRISS-CROSS CYKLOADUKTŮ POMOCÍ ELEKTROFILNÍCH ČINIDEL

Hana Zachová[a], Stanislav Man[a], Jan Taraba[b], Milan Potáček[a]

[a]Katedra organické chemie, Masarykova Univerzita v Brně, Kotlářská 2, 611 37 Brno, Česká Republika, E-mail: hankaz@volny.cz
[b]Katedra anorganické chemie, Masarykova Univerzita v Brně, Kotlářská 2, 611 37 Brno, Česká Republika

Intramolekulární criss-cross cykloadiční reakcí symetrických homoallenylazinů vznikají ve vysokém výtěžku nové tetracyklické heterocyklické sloučeniny se čtyřmi kondenzovanými pětičlennými kruhy [1]. Tyto kruhy jsou orientované kolem centrální vazby N-N. Tato reakce byla poprvé pozorována na našem pracovišti v rámci systematického studia criss-cross cykloadičních reakcí jako zvláštního případu následných 1,3-dipolárních cykloadičních reakcí [2,3]. Při studiu vlastností produktů intramolekulárních criss-cross cykloadicí byla nalezena zcela nová a zajímavá reakce. Při této reakci dochází k přesmyku cykloaduktů za vzniku nových heterocyklických sloučenin se dvěma šestičlennými a dvěma pětičlennými kruhy. Tento nový přesmyk byl nejprve pozorován v kyselém prostředí v přítomnosti redukčního činidla ($NaBH_3CN$). Při reakci docházelo ke štěpení jednoduché vazby mezi dusíky a ke vzniku nové vazby mezi uhlíky na dvojné vazbě, které jsou v β poloze vůči dusíkům. K podobné reakci dochází i v případě, že je kyselina nahrazena elektrofilním činidlem. Pokud není použito redukční činidlo jsou izolovány jako produkty stabilní kvarterní iminiové soli. Reakce probíhá velmi dobře, pokud se použijí jako elektrofilní činidla methyl jodid, benzyl jodid nebo allylbromid. Když se reakce provádějí v bezvodém prostředí v chloroformu, snižuje se vznik nečistot. Takto připravené látky jsou zajímavé především svojí novou strukturou a celkem snadnou přípravou v relativně vysokých výtěžcích a čistotě.



[1] H. Zachová, S. Man, M. Nečas, M. Potáček: *Eur. J. Org. Chem.,* 2548-2557, (2005)
[2] M. Potáček, R. Marek, Z Žák: *Tetrahedron Lett., 34,* 51, 8341, (1993)
[3] H. Zachová: *Diplomová práce*, Masarykova Univerzita (2003)

3Po108

AGREGAČNÍ ROZDÍLY MEZI FTALOCYANINY A JEJICH AZAANALOGY

Petr Zimčík, Miroslav Kostka, Miroslav Miletín, Zbyněk Musil, Kamil Kopecký

Katedra farmaceutické chemie a kontroly léčiv, Univerzita Karlova v Praze, Farmaceutická fakulta, Heyrovského 1203, Hradec Králové, Česká Republika, 50005, E-mail: petr.zimcik@faf.cuni.cz

Ftalocyaniny (phthalocyanines, Pc) a jejich azaanalogy azaftalocyaniny (AzaPc) patří mezi velice rozšířenou skupinu syntetických barviv nacházejících uplatnění v mnoha oborech současné techniky (barviva, optické senzory, činidla při elektrokatalytické oxidaci, aj.) i medicíny (fotodynamická terapie) [1]. Mezi nevýhody těchto planárních makrocyklických systémů ovšem patří silná schopnost agregace podporující vznik převážně dimerů, což silně (negativně) ovlivňuje rozpustnost, purifikaci, charakterizaci látek a zejména jejich další využití. Jednou z možností eliminace této nevhodné charakteristiky patří periferní substituce objemnými substituenty nebo dlouhými alifatickými řetězci [2].

V naší práci jsme se zaměřili na porovnání agregačních vlastností Pc a AzaPc a srovnání vlivu periferní substituce na schopnost inhibovat přechod do agregované formy. Byly syntetizovány hořečnaté komplexy Pc i AzaPc se dvěma typy periferních substituentů - *terc*-butylsulfanyl (jako reprezentant objemných substitucí) a *n*-oktylsulfanyl (jako příklad dlouhých alifatických řetězců). Agregační schopnosti těchto čtyř látek byly poté studovány spektrofotometricky (dimerní a monomerní forma se výrazně liší ve svých UV-VIS spektrech) v toluenu. Z těchto měření jsme regresní analýzou získali hodnoty dimerizační konstanty K_D charakterizující rovnovážnou rovnici: 2 monomer→dimer. Za použití K_D byly poté vypočítána spektra čistě monomerní a čistě dimerní formy jednotlivých látek. Hodnoty K_D klesají v pořadí AzaPc(oktyl) > Pc(oktyl) > AzaPc(*terc*-butyl) > Pc(*terc*-butyl). Z toho vyplývá, že Pc jsou náchylnější k agregaci méně než AzaPc a že použití objemných *terc*-butyl substituentů vede v daleko vyšší míře k inhibici této nevýhodné vlastnosti než použití *n*-oktyl substituentů.

Práce vznikla za podpory výzkumného záměru číslo MSM0021620822.

[1] C.M. Allen, W.M. Sharman, J.E. van Lier, *J. Porphyr. Phthalocyanines*, 5, 161-169, (2001)
[2] M.T.M. Choi, P.P.S. Li, D.K.P. Ng, *Tetrahedron, 56*, 3881-3887, (2000)

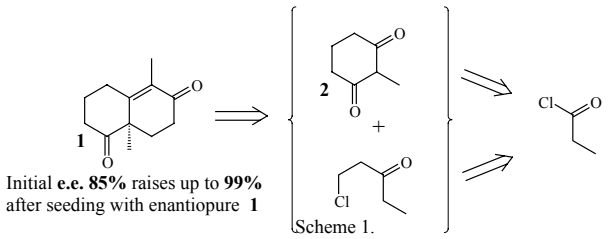
3Po109

LARGE SCALE AND CONVERGENT PREPARATION OF (-)-*R*-WIELAND-MIESCHER DIKETONE ANALOGUE STARTING FROM PROPIONYL CHLORIDE AND DIETHYL MALONATE

Daniel Žatko[a], Don Antoine Lanfranchi[b], Gilles Hanquet[b]

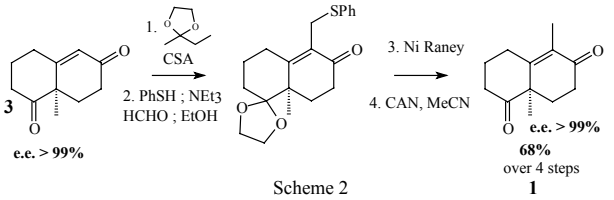
[a]*Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského v Bratislave, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava 4, Slovakia, E-mail: salisova@fns.uniba.sk;*
[b]*Université Louis Pasteur, Laboratoire de Stéréochimie, ECPM, 67087 Strasbourg, France, E-mail: ghanquet@chimie.u-strasbg.fr*

(-)-*R*-Wieland-Miescher diketone analogue **1** is a widely used chiral starting material for total synthesis of several natural terpenoids and steroids.[1] The commonly used methodology to prepare **1** starts from the two very expensive cyclohexanedione **2** and ethylvinylketone moreover the enantioselective annelation needs five days at a temperature which is raised in 10°C intervals in every 24 hours.[2] We describe here a very cheap and convergent preparation of enantiomerically pure **1** *via* cyclohexanedione **2** starting from propionyl chloride in very large scale (Scheme 1).



Scheme 1.

The previously described Hajos-Parrish-Eder-Sauer-Wiechert type reaction used is less stereoselective than Hagiwara procedure (85% e.e. instead of 92%) but the annelation needs only two hours.[3] The resulting chiral non racemic material can be enriched up to 99% e.e. by seeding with an enatiopure crystal of **1** prepared from commercially available enantiomerically pure (-)-*R*-Wieland-Miescher diketone **3** (Scheme 2).



Scheme 2

[1] See: Tokoroyama, *T. Synthesis, 611,* (2000), and references therein
[2] Hagiwara H., Uda H. *J. Org. Chem., 53,* 2308-2311, (1988)
[3] Uma R., Rajagolapan K., Swaminathan, S., *Tetrahedron, 42*, 2757-2769, (1986)

3Po110

ω-PYRIDINIUMHEPTYLETHERY ESTROGENŮ A JEJICH BENZYLSULFANYL DERIVÁTY: NOVÉ SLOUČENINY S POTENCIÁLNÍ ANTIBAKTERIÁLNÍ, ANTIMYKOTICKOU A ANTIPROLIFERATIVNÍ AKTIVITOU

J. Adamec,[a] R. Beckert,[b] D. Weiß,[b] V. Klimešová,[a] U. Möllmann,[c] J. Kaustová,[d] V. Buchta,[e] K. Waisser[a]

[a]*Katedra anorganické a organické chemie, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Univerzita Karlova v Praze, Heyrovského 1203, Hradec Králové, 500 05, Česká Republika, e-mail: adamec@faf.cuni.cz, Waisser@faf.cuni.cz*
[b]*Institut für Organische Chemie und Makromolekulare Chemie der Friedrich-Schiller-Universität Jena, Lessingstr. 8, D- 07743 Jena, Deutschland, e-mail: Rainer.Beckert@uni-jena.de, c5wedi@rz.uni-jena.de*
[c]*Hans-Knöll-Institut für Naturstoffforschung, Beutenbergstr. 11, D-07745 Jena, Deutschland, e-mail: Ute.Moellmann@hki-jena.de*
[d]*Státní zdravotní ústav se sídlem v Ostravě, Oddělení pro diagnostiku Mycobakterií, Laboratoř pro Mycobacterium kansasii, Partyzánské nám. 7 , Ostrava 702 00 , Česká Republika, e-mail: jarmila.kaustova@zuova.cz*
[e] *Katedra lékařských a biologických věd, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Univerzita Karlova v Praze, Heyrovského 1203, Hradec Králové, 500 05, Česká Republika, e-mail: buchta@faf.cuni.cz*

Pyridiniové soli steroidních fenolů vykazují nadějnou biologickou aktivitu (antibakteriální, antimykobakteriální, antimykotickou a antiproliferativní)[1].

3-hydroxy-estra-1,3,5(10)-trien-17-on reaguje s přebytkem ω,ωī-dibromheptanu za vzniku ω-bromoheptyloxy-estra-1,3,5(10)-trien-17-onu. Následnou reakcí s pyridinem (popř. benzylsulfanyl derivátem pyridinu) v prostředí acetonitrilu v atmosféře argonu se získá příslušná bromidová sůl žádané ω-pyridiniumheptyloxylové sloučeniny estrogenu.

Významná antibakteriální aktivita se projevuje in vitro na kmenech: *Bacillus subtilis, Staph. aureus, Microc. luteus* a *Enteroc. Faecalis*. Antimykobakteriální účinky u kmenů *Mycobacterium tuberculosis, M. kansasii, M. avium, M. smegmatis, M. aurum, M. vaccae* a *M. fortuitum Borstel*. Dále se také provádí antimykotické hodnocení na kmenech: *Candida albicans, C. tropicalis, C. krusei, C. glabrata, Trichosporon beigelii, T. mentagrophytes, Aspergillus fumigatus a Absidia corymbifera*. V Hans-Knöll-Institutu se též zjištuje cytotoxicita (HeLa buňky) a antiproliferativní aktivita proti buněčným liniím K-562 a L 929.

Tento projekt byl uskutečněn za finanční podpory: výzkumný záměr MSM 0021620822, grant FRVŠ 42/G6/2005, projekt Erasmus-Sokrates a Deutsche Forschungsgemeinschaft SFB 436.

[1] C.Lange, N.Holzhey, B.Schönecker, R.Beckert, U.Möllmann, H.-M.Dahse., *Bioorganic & Medicinal Chemistry*, 12, 3357-3362 (2004)

3Po111

IDENTIFICATION OF ALL 93 ISOMERIC ACYCLIC OCTENES IN FLUID CATALYTIC CRACKED GASOLINE

G. Addová[1], H. Jurdáková[1], R. Kubinec[1], Ž. Frčková[1], J. Blaško[1], A. Kraus[2], L. Soják[1], A. Boháč[3]

[1] Institute of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Mlynská dolina, Bratislava 84215, Slovak Republic
[2] Institute of Analytical and Environmental Chemistry, Martin Luther University, Halle-Wittenberg 06120, Germany
[3] Department of Organic Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Mlynská dolina, Bratislava 84215, Slovak Republic

Alkenes are important products of many crucial reactions and processes, as well as they represent environmental contaminants mainly as anthropogenic fuel emissions [1, 2]. The Kováts retention indices of all C5-C8 acyclic alkenes on squalane were published by Matukuma [3], however, retention indices for certain alkenes are significantly distinct from those published later by other authors. In this work the Kováts retention indices of all 93 acyclic octenes on polydimethylsiloxane and squalane as stationary phases as well as their mass spectra were measured. The means of gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS) were used for confirmation of GC identification as well as for mass spectrometric deconvolution of the majority of gas chromatographic unseparated isomeric octene peaks. The distinction between corresponding *E* and Z acyclic octenes, that is either difficult or even impossible by means of GC-MS, was obtained on the basis of larger temperature coefficients of retention indices for Z isomeric octenes than for corresponding *E* isomers. The retention data expressed as homomorphy factors were correlated with the degree of branching, position of double bond, and position of alkyl group with respect to the double bond of acyclic octenes, and the structure-retention relationships were formulated. The 81 acyclic octenes were identified in FCC gasoline.

[1] E. Pescarollo, R. Trotta, P.R. Sarathy, Hydrocarbon Process 2 (1993) 65.
[2] E.N. Chen Jr., D.E. Drinkwater, J.M. McCann, J. Chromatogr. Sci. 33 (1995) 353.
[3] A. Matukuma, in: C.L.A. Harbourn, R. Stock (Eds.), Gas Chromatography, 1968, Institute of Petroleum, London, 1969, p. 55.

4Po01

PROF. BABOROVSKÝ - 130. VÝROČÍ NAROZENÍ

Miloslav Pekař, Martina Klučáková

Ústav fyzikální a spotřební chemie, Fakulta chemická, Vysoké učení technické v Brně, Purkyňova 118, 612 00 Brno, pekar@fch.vutbr.cz

Dne 28. srpna 2005 vzpomínáme 130. výročí narození významného českého fyzikálního chemika, prof. PhDr. et PhMr. Jiřího Baborovského, jednoho z průkopníků této disciplíny v českých zemích. Jiří Baborovský absolvoval studia farmaceutická a přírodovědná na Univerzitě Karlově v Praze. V letech 1902-1905 studoval v Lipsku, na ústavu věhlasného W. Ostwalda. Po návratu působil na Karlově univerzitě, kde se snažil prosadit fyzikální chemii jako samostatnou a svéprávnou disciplínu chemických věd. Přestože v tomto oboru dosáhl habilitace (1905) a mimořádné profesury (1911), naráželo jeho úsilí na nemalé překážky. Téměř ideální podmínky nalezl na brněnské české technice, kde byl v roce 1911 založen chemický odbor a prof. Baborovský na něj povolán jako zakladatel Ústavu theoretické a fyzikální chemie. V následujícím roce zde byl jmenován řádným profesorem fyzikální chemie. Ústav řídil až do své smrti v roce 1946. Hlavní náplní vědecké práce prof. Baborovského a jeho ústavu bylo studium hydratace iontů, pro něž zdokonalil původní Nernstovu metodu. Za dobu existence ústavu z něj vyšlo přes padesát prací na toto téma. Prof. Baborovský byl autorem první české učebnice fyzikální chemie, zdařilé knižní příručky pro praktická cvičení ve fyzikální chemii a autorem poněkud populárnějšího spisku o koloidech. Právem jej lze zařadit do galerie významných fyzikálních chemiků.

4Po02

CHEMICKÉ SLOŽENÍ A BUNĚČNÁ STAVBA ORGANIZMŮ - UČEBNÍ ÚLOHY

Hana Matějková, Věra Čížková, Hana Čtrnáctová

Univerzita Karlova v Praze - Přírodovědecká fakulta, Albertov 6, Praha 2, 128 40
matejkovahanka@volny.cz, veciz@natur.cuni.cz, ctr@natur.cuni.cz

Koncepce a pojetí výuky chemie na základních a středních školách v ČR se v současnosti postupně mění v důsledku realizace rámcových a na ně navazujících školních vzdělávacích programů. Chemie je chápána jako jeden z předmětů integrované oblasti Člověk a příroda. Aktivní osvojování a ověřování učiva této oblasti vyžaduje, aby žáci byli schopni integrovat poznatky více přírodovědných oborů. Proto jsme se zaměřili na tvorbu učebních úloh na rozhraní chemie a biologie. Zároveň nás zajímalo, jaký vliv má na výsledky řešení forma úloh.

K tématu Chemické složení a buněčná stavba organizmů bylo vytvořeno 20 úloh testu A a 20 úloh testu B. Varianta testu A obsahovala různé typy uzavřených úloh, např. výběr

správné odpovědi z daných alternativ, přiřazování nebo řazení tvrzení či pojmů, výběr z odpovědí ano-ne. Varianta testu B byla tvořena pouze otevřenými úlohami, ve kterých museli žáci odpověď sami vytvořit. Úlohy v obou testech byly obsahově ekvivalentní.

Každý test byl ověřen na skupině přibližně sto žáků maturitních ročníků gymnázií. Vlastnosti testu a úloh byly shrnuty pomocí analýzy úloh a celkové charakteristiky testu, kde se srovnávala obtížnost, citlivost a vynechanost úloh v obou variantách testu.

Obě varianty testu jsou podle výsledků analýzy středně obtížné (úspěšnost A je 62,3 %, B 48,0 %). Hodnota citlivosti vyšla u testu A dostatečná (46,5%), u testu B vysoká (61,8%). Hodnoty koeficientů reliability jsou u obou variant vysoké (A 0,835, B 0,936).

Z analýzy testů a jednotlivých úloh lze vyvodit, že otevřené úlohy jsou pro žáky obtížnější než odpovídající úlohy uzavřené a žáci se také mnohem častěji jejich řešení vyhýbají, ale na druhé straně tyto úlohy lépe rozlišují mezi lepšími a horšími žáky něž ekvivalentní uzavřené úlohy.

[1] Čížková, V., Čtrnáctová, H.: *Use of Didactic Tests in Assessment of Pupils' Science Knowledge*. In: Science and Technology Education for a Diverse World - dilemmas, needs and partnerships - XIth IOSTE World Symposium Proceedings. Lublin, 99-104 (2004).
[2] Chrástka, M.: *Didaktické testy.* Brno: Paido, 91 s. (1999).
[3] Jeřábek, J. a kolektiv: *Rámcový vzdělávací program pro gymnáziální vzdělávání* (pilotní verze). Praha: VÚP - ÚIV Tauris, 96 s. (2004).

4Po03

ŠKOLNÍ EXPERIMENTY S MODELY PALIVOVÝCH ČLÁNKŮ

Pavel Opatrný, Martin Bílek

Katedra chemie, Pedagogická fakulta, Univerzita Hradec Králové, Rokitanského 62, 500 03 Hradec Králové, Pavel.Opatrny@uhk.cz; Martin.Bilek@uhk.cz

Palivové články jsou v současné době jedním z aktuálních, ale přitom v obsahu učiva na základních i středních školách chybějících témat. To potvrzuje i analýza znalostí a postojů studentů gymnázií v České republice získaných prostřednictvím dotazníku „Obnovitelné a neobnovitelné zdroje energie a jejich využití“ [1]. Z těchto důvodů byl vytvořen na Katedře chemie PdF UHK výkladový CD-ROM „Podstata a objasnění funkce palivového článku“ [2]. Experimentální část inovace kurikula v této oblasti tvoří odladěné žákovské pokusy s modely palivových článků, a to jednak se soupravou „Schülerübungkasten Komplett“ a jednak s modelem autíčka „hydro-Genius® Brennstoffzellen-Modellauto“ od německé firmy Heliocen-tris (http://www.heliocentris.com) [3]. Experimentální základ pro studenty SŠ tvoří experimenty *„Charakteristika elektrolyzéru“* a *„Charakteristika palivového článku“*. Cílem prvního je sledování změn elektrolytického proudu a určení tzv. rozkladného napětí, v druhém experimentu jde o přípravu a využití plynů v kyslíko-vodíkovém palivovém článku a určení jeho jednotlivých charakteristik. Po žáky základních škol jsou výchozími experimenty s reversibilním palivovým článkem *„Co pohání automobil s palivovým článkem“* a *„Vodík jako „nosič energie“*. Cílem prvního je určit druh paliva, druhy a přeměny energie probíhající při uvedení modelu do pohybu, v druhém jde o přeměnu solární energie v energii chemickou a její následnou přeměnu v energii elektrickou, pohánějící elektromotorek.

[1] Opatrný, Pavel. *Experimentální činnost ve výuce chemie na SŠ. Školní modely palivových článků.* [Diplomová práce], Hradec Králové: Katedra chemie PdF UHK, 2005.
[2] Opatrný, Pavel: Podstata a objasnění funkce palivového článku - CD-ROM. Hradec Králové: Katedra chemie PdF UHK, 2004.
[3] Opatrný, Pavel, Bílek, Martin. Palivové články a jejich školní modely. Alternativní energie, 2004, roč. 7, č. 6, s. 34 - 35.

4Po04

VIZUALIZACE ŘEŠENÍ VYBRANÝCH ÚLOH Z CHEMIE POMOCÍ MOLEKULÁRNÍCH MODELŮ

Karel Myška, Karel Kolář, Milan Marek

Katedra Chemie, Pedagogická fakulta UHK, Hradec Králové, karel.myska@uhk.cz

Výuka organické chemie na všech typech škol se většinou uskutečňuje s využitím tradičních prostředků, mezi které řadíme především učebnice, transparenty, materiální modely apod. Vzhledem k náročnosti tohoto učiva je třeba tento obvyklý přístup inovovat, především jedná-li se o učivo, vztahující se k problematice struktury a reaktivity organických sloučenin.

Při výuce těchto tematických celků organické chemie se v současné době na katedře chemie PdF UHK s úspěchem využívá výstupů (převážně tištěných) programů pro molekulární modelování. Mezi tyto programy řadíme např. PC Spartan Pro, Mac Spartan Pro nebo Gaussian. Programy nabízí řadu alternativ vyjádření struktury látek pomocí dvourozměrných i třírozměrných molekulárně-mechanických modelů, které znázorňující určitou vlastnost molekuly pomocí barevného kódu (mezi tyto vlastnosti řadíme elektrostatický potenciál).

Tyto modely dovolují studentům blíže poznat např. rozložení elektronových hustot v molekulách, a tím usuzovat na možné fyzikální, chemické i biologické vlastnosti molekul, vycházející z jejich struktury.

Počítačové modely sloučenin představují prostředky názorné výuky chemie, které přesvědčivým způsobem přispívají k prezentaci učiva o struktuře a vlastnostech molekul v organické chemii. Jsou příkladem aplikací kvantově - chemických výpočtů využitelných v pedagogické praxi.

[1] Shusterman, G., P., Shusterman, A., J.: *J. Chem.Educ.* 74, (1997), 771
[2] Hehre, W,. J., Yu, J., Klunzinger, P., E., Lou, L.: *A Brief Guide to Molecular Mechanics and Quantum Chemical Calculations*, Wavefunction, Inc., Irvine 1998

4Po05

STŘEDOŠKOLSKÝ A VYSOKOŠKOLSKÝ SYSTÉM VÝUKY CHEMIE OČIMA STUDENTŮ

Veronika Řezáčová

Ústav chemie a technologie ochrany životního prostředí, Fakulta chemická,
Vysoké učeni technické v Brně, Purkyňova 118,
612 00 Brno, Česká republika
e-mail: rezacova@fch.vutbr.cz

Výuka chemie na středních školách (SŠ), a to jak na SŠ odborných či gymnáziích, i na vysokých školách (VŠ) chemického zaměření, se vyznačuje určitou charakteristikou. Tato vychází z definovaného cíle výuky a zahrnuje především nové pojmy a poznatky, které si studenti na podkladě předchozích znalostí a dovedností osvojují.

V příspěvku jsou shrnuty výsledky průzkumu zkušeností studentů se systémem výuky chemie na SŠ a na VŠ. Pozornost byla zaměřena na zpracování dotazníku a doplňující komentář vyhodnocených výsledků. Názor samotných studentů na oba typy výuku získaný z dotazníku může posloužit vyučujícím jako mnohdy chybějící zpětná vazba výukového procesu.

Dotazník sestával z 20 otázek a byl vyplněn 116 studenty III. ročníku Fakulty chemické VUT v Brně. Skupina respondentů byla vybrána s ohledem na dostatečný časový odstup od studia na SŠ a zároveň dostatečné obeznámení se se systémem výuky na VŠ. Oba výše uvedené faktory jsou klíčem pro objektivní srovnání SŠ a VŠ systémů výuky.

Z řady zajímavých výsledků je patrná velmi odlišná úroveň znalostí a dovedností absolventů odborných SŠ a gymnázií. Rozdíly, se kterými se studenti při studiu chemie na VŠ musí vyrovnat, jsou markantní v úrovni znalostí cizích jazyků a praktické činnosti v laboratorních cvičeních.

4Po06

NEW FORMS AND METHODS EDUCATION IN THE REGION RUBBER TECHNOLOGY (E-LEARNING)

Jana Šulcová*, Alfonz Plško*, Peter Janypka**, Zuzana Golitková**

** Fakulta priemyselných technológií Trenčianskej univerzity Alexandra Dubčeka, Ul. I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov, Slovensko,sulcova@fpt.tnuni.sk*
*** Matador a.s., T.Vansovej 020 01 Púchov, Slovensko, peter.janypka@matador.sk*

We have a want of new forms and methods of learning in education in present. One of them is also virtual learning (e-learning). The pilot project Leonardo da Vinci is oriented on e-learning and it is realized by assistances EU. The partners are from Finland Sweden, Holland and Slovakia. Fundamental of this system is virtual teaching and verification of knowledges in the region rubber technologies. Teaching will be realized in English, Finland and Slovak language. Teaching is orienting on academic education, training courses for employee in rubber industry and graduate education in existent specialization. Advantage is teaching without restrictions of place, easy access to the educational materials. Whole system is built on materials in JAVASCRIPT and JAVA.

4Po07

ĎALŠIE VZDELÁVANIE UČITEĽOV CHÉMIE DIŠTANČNOU FORMOU - MERANIE EFEKTIVITY

Lucia Kukľová

Prírodovedecká fakulta UPJŠ, Ústav chemických vied, Moyzesova 11, 041 54 Košice
kuklova@upjs.sk

Ďalšie vzdelávanie učiteľov chémie dištančnou formou sme realizovali na Prírodovedeckej fakulte UPJŠ v Košiciach v spolupráci s Fakultou prírodných vied UMB v Banskej Bystrici. Štúdium prebiehalo v rámci dvojsemestrálneho (v období január 2004 - január 2005) dištančného kurzu „Chémia bežného života.“ Obsahom vzdelávania boli nasledovné témy: 1. Chémia bežného života, 2. Kyseliny a zásady bežného života, 3. Chémia nás živí - Bielkoviny, Sacharidy, Tuky v bežnom živote, 4. Chémia vody, pôdy, vzduchu.

Meranie efektivity dištančného vzdelávania sme uskutočňovali Kirpatrickovou metodikou.

Stupeň 1: Reakcia - ako študujúci reagujú na výučbu?
- 100% učiteľov (priemerný vek 40 rokov, 30% nad 50 rokov, 70% pod 50 rokov) reagovali na dištančnú formu štúdia pozitívne.

Stupeň 2: Správanie - ako sa zmenilo správanie študujúcich po ukončení vzdelávania?
- 95% učiteľov ovplyvnilo dištančné vzdelávanie v kladnom zmysle, pre cca 50% bolo dobrou motiváciou a nabádalo ich k vybočeniu z rutiny, 80% učiteľov uviedlo získanie počítačových zručností a využívanie počítača pri príprave na vyučovaciu hodinu chémie, takmer 35% aj priamo na hodinách chémie.

Stupeň 3: Výučba - koľko sa toho študujúci naučili?
- 100% úspešnosť dosiahli učitelia pri odpovediach na zadané otázky a úlohy týchto tém: Chémia bežného života, Kyseliny a zásady bežného života, Chémia vybraných potravín,
- cca 93% úspešnosť témy Chémia nás živí.

Stupeň 4: Výsledky - aký efekt, dopad malo ich vzdelávanie na ich inštitúciu?

V závere chceme poďakovať Kultúrnej a edukačnej grantovej agentúre Ministerstva školstva Slovenskej republiky za finančnú podporu na realizáciu tohto projektu KEGA č. 3/106403 „Ďalšie vzdelávanie učiteľov chémie s využitím dištančnej vzdelávacej technológie.“

[1] Ganajová, M., Kukľová, L., Lichvárová, M.: Die Effektivität der Wieterbildung der Chemielehrer in der Slowakei durch die Vermittlung der Distanzbildungstechnologie [Efektívnosť ďalšieho vzdelávania

učiteľov chémie na Slovensku prostredníctvom dištančnej vzdelávacej technológie]. In: *Kongressband 8. Europäischer Chemielehrerkongress Eisenstadt*. 2005, s. 76-77.
[2] Kukľová, L., Ganajová, M.: Distance Education in Chemistry [Dištančné vzdelávanie v chémii]. In: *XLVII Zjazd Ptchem i SITPChem Wroclaw*. 2004, s.1133.
[3] *Tvorba študijného balíka pre dištančné vzdelávanie*, 2003 [CD-ROM]. (Košice) VAT-Virtuálny autorský tím pre dištančné online vzdelávanie, 2003.

4Po08

CHEMICKÁ LABORATOŘ NA NÁMĚSTÍ - JARMARK 2005

Klečková Marta, Adámková Šárka, Adamovský Pavel, Baertheldyová Eliška, Bajerová Kateřina, Baran Pavel, Barnetová Anna, Barták Petr, Bazgerová Jana, Bažant Petr, Bednář Petr, Bechr Josef, Beštová Radka, Betlachová Lenka, Bezová Ilona, Blažková Daniela, Cankař Petr, Cyprichová Simona, Čamková Magdaléna, Čáp Lubomír, Dašuová Adéla, Dědek Tomáš, Digaňová Eliška, Dořičáková Aneta, Drábek Jíří, Drábková Jitka, Drlíková Taťána, Fadrná Veronika, Ferdan Roman, Floková Kristýna, Foltýnová Marcela, Frnka Jiří, Frnková Pavlína, Fryčák Petr, Frydrychová Martina, Galuska Petr, Gasmánek Roman, Greplová Zuzana, Grézlová Pavlína, Gucký Tomáš, Guziurová Gabriela, Halenková Lenka, Hanáková Monika, Hendrychová Tereza, Hlaváč Jan, Hodaňová Jitka, Holíková Lenka, Holubová Renata, Hošková Miroslava, Hradil Pavel, Hulvová Helena, Hybšová Vladimíra, Chalupová Marie, Cholek Zdeněk, Chrastina David, Ibříšková Soňa, Jablonská Hana, Jánošová Marie, Janoušek Michal, Jarešová Veronika, Jefimová Gabriela, Kadalová Lenka, Kameníček Jiří, Kaštil Petr, Kiliánová Jana, Klapsiová Karin, Klepetková Pavla, Klimčíková Kateřina, Kohnacká Naďa, Kopel Pavel, Koryťáková Romana, Kosztyu Petr, Kotouček Milan, Koutná Šárka, Král David, Krátká Dana, Kratochvílová Martina, Krätschmerová Hana, Krausová Ludmila, Krausová Marie, Krejčiříková Marie, Krhoňková Marcela, Křupková Soňa, Kubátová Eva, Kubicová Kamila, Kubienová Lucie, Kubínek Roman, Kubinová Monika, Kuchyňová Hana, Kulhánková Barbora, Kurečka Aleš, Kvapil Jiří, Kvítek Libor, Lakomá Petra, Lemr Karel, Lemr Karel jr., Lípová Lenka, Luhová Lenka, Macháňová Petra, Machová Markéta, Maier Vítězslav, Marušák Zdeněk, Matulková Zuzana, Matušková Zuzana, Menzelová Regina, Mikešová Žaneta, Milde David, Molnár Josef, Moravčíková Kateřina, Muchová Dominika, Műller Lukáš, Němcová Barbora, Nisler Jaroslav, Novák Petr, Nováková Jitka, Novotná Aneta, Oborný Radek, Otyepka Michal, Otyepková Eva, Oždian Tomáš, Páleníková Lenka, Panáček Aleš, Pantlík Ondřej, Papoušková Alice, Papoušková Barbora, Paroblová Dita, Pavlíček Marek, Doleželová Pavlína, Pěnčík Jan, Peterek Aleš, Petr Jan, Petřivalský Marek, Pírek Miroslav, Pohlodek Jiří, Pospěch Miloš, Pospíšek Antonín, Pospíšil Michal, Pospíšková Kristýna, Prečová Martina, Přindiš Jan, Ranc Václav, Remešová Hana, Rozumová Petra, Řečinská Jana, Řeháková Lenka, Schlosserová Dušana, Sklenovský Petr, Skopalová Jana, Slavíčková Karla, Slovák Václav, Slováková Kateřina, Smékal Zdeněk, Smetková Michaela, Smolná Jitka, Součková Jitka, Soural Miroslav, Spáčilová Lucie, Stašková Hana, Stoklasa Bohumil, Stránská Vendula, Strouhal Ondřej, Střídová Kateřina, Studená Hana, Stýskala Jakub, Suralová Lucie, Šálková Soňa, Šebela Marek, Ševčík Juraj, Ševčíková Tereza, Ševčíková Zuzana, Šimasová Petra, Šimo Martin, Šindela Petr, Šindelář Zdeněk, Škapová Petra, Škarohlíd Jiří, Škrobánková Hana, Šmidová Kateřina, Šnyrychová Iva, Štajgerová Lenka, Štarha Pavel, Štětka Miroslav, Tomášek David, Tomková Jana, Tomková Jitka, Tomková Markéta, Topičová Petra, Trefilová Darina, Tunka Ondřej, Tylichová Martina, Vaclová Tereza, Vala Zbyněk, Vaňousová Alena, Vašíčková Martina, Vaverka Stanislav, Velebová Zuzana, Veselá Jana,Vítková Kateřina, Vyoralová Kateřina, Zajoncová Ludmila, Zapadlo Michal, Zapletalová Lenka, Zelený Tomáš, Zemánková Pavla, Zlámal David

Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého, tř.Svobody 8, 771 46 Olomouc, ČR
kleckova@prfnw.upol.cz

Již pátým rokem pořádaly katedry Přírodovědecké fakulty Univerzity Palackého v Olomouci Jarmark fyziky, chemie a matematiky, velkolepou přehlídku zajímavých experimentů. Tento způsob prezentace přírodních věd přináší široké veřejnosti diametrálně odlišný pohled na tolik neoblíbené předměty - fyziku, chemii a matematiku.

Hlavním cílem celé akce bylo ukázat chemii z jiné stránky než jak ji návštěvníci znají ze školních lavic. Chemie není jen snůška vzorců, rovnic a složitých výpočtů, ale je vědou, jejíž výsledky bez uzardění využíváme v běžném životě (léčiva, kosmetické přípravky, barviva, detergenty, potravinové doplňky, plasty, stavební materiály), při analýze čistoty životního prostředí, ve zdravotnictví, stavebnictví, hutnictví, apod. Úzké spojení chemie s prak-tickým životem jsme demonstrovali prostřednictvím zajímavých experimentů, na jejichž realizaci se účastníci Jarmarku většinou sami podíleli.

Na olomouckém náměstí přímo před radnicí vyrostla v desítkách stánků improvizovaná laboratoř, kde si zájemci sami mohli stanovit množství dusičnanů a základních anorganických iontů ve vodě, analyzovat přinesený vzorek slivovice, zkontrolovat UV-filtr brýlí, vyčistit zlaté a stříbrné šperky pomocí ultrazvuku, ale zejména prostřednictvím těchto profesionálních experimentů zjistit, že chemie je cenný pomocník v denním životě. Pro mladší návštěvníky byla připravena celá řada efektních pokusů, které podnítily touhu mladých experimentátorů zjistit podstatu pozorovaného jevu. Exploze směsi vodík-vzduch, barevné bengálské ohně, bleskurychlé vzplanutí nitrocelulózy, sopka na stole a celá řada dalších „akčních“ experimentů zaujala i ty nejpasivnější teenagery.

Novinkou tohoto ročníku byla aktivní účast mladých učitelů chemie (čerstvých absolventů PřF UP) se svými žáky, kteří sami připravili sérii jednoduchých, bezpečných a efektních experimentů. Interpersonální percepce mezi vrstevníky sehrávala jednoznačně pozitivní úlohu ve vzájemné komunikaci a realizaci připravených pokusů. Tento trend prezentace experimentů „děti dětem“ otvírá novou formu v popularizaci přírodních věd a bude výrazně podporován i v dalších ročnících Jarmarku fyziky, chemie a matematiky.

4Po09

VEDOMOSTI Z CHÉMIE REPRODUKOVAŤ ALEBO ICH TVORIVO VYUŽÍVAŤ?

Vladimír Š. Fajnor, Jana Chrappová

Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava 4
chrappova@fns.uniba.sk

Podľa nášho presvedčenia patrí k základným cieľom pedagogickej činnosti formovanie kreatívnych osobností, ktorých schopnosti nie sú limitované výhradne na jednoduchú reprodukciu. Z tohto zorného uhla sme analyzovali výsledky písomných štátnych bakalárskych skúšok z chémie na našej fakulte v minulom školskom roku. Skúšky absolvovalo 70 študentov (zo všetkých krajov SR). Z 12 otázok sme vybrali dve otázky „encyklopedického charakteru“ (dve definície) a dve otázky zamerané na aplikáciu naučených vedomostí, ako napríklad: „Aký je geometrický tvar molekuly ClF3 a aká je hodnota valenčných uhlov v tejto molekule?“

V prvom prípade bola úspešnosť riešenia 73,5%, v druhom len 39,3%. Pozoruhodné je tiež, že plný počet bodov dosiahlo v prvom prípade (dve definície) 41 študentov (58,8%), ale v druhom prípade len dvaja zo sedemdesiatich.

Tento značne výrazný rozdiel potvrdzuje, že nielen študenti, ktorí sa hlásia na našu fakultu (skúsenosti z prijímacích skúšok), ale aj absolventi bakalárskeho stupňa vykazujú podstatne lepšie výsledky pri reprodukcii formálne osvojených (encyklopedických) poznatkov. V súčasnej dynamicky sa rozvíjajúcej informačnej spoločnosti sa však uplatňujú najmä jedinci disponujúci operatívnymi poznatkami so schopnosťou ich tvorivého využívania. Tomuto trendu bude potrebné prispôsobiť výučbu (chémie) a prípravu nových študijných materiálov.

Výskum bol podporený grantom MŠ SR KEGA č. 3/115803

4Po10

SPOLUPRÁCE CENTRA PRO ZJIŠŤOVÁNÍ VÝSLEDKŮ VZDĚLÁVÁNÍ S VŠ V OBLASTI EVALUACE A VZDĚLÁVÁNÍ UČITELŮ CHEMIE

Marie Vasileská

Ústav pro informace ve vzdělávání - divize CERMAT, Senovážné nám. 26, 110 00 Praha 1, pracoviště Jeruzalémská 12, 110 00 Praha 1, vasileska@cermat.cz

V návaznosti na probíhající legislativní změny vyplývající ze schválení tzv. školského zákona a v souladu s požadavky Evropské unie vznikla v našem školství potřeba zajistit průhledné, vypovídající a vzájemně měřitelné výsledky vzdělávání. Od 1. ledna 2006 bude vytvořeno Centrum pro zjišťování výsledků vzdělávání (označení CERMAT) jako samostatná státní instituce, která bude mít tuto oblast ve své kompetenci. MŠMT ČR si je vědomo velké závažnosti řešené problematiky a proto prostřednictvím skupiny regionálního školství předložilo do ESF - SP KVALITA I projekt s názvem: Vytvoření systému externího monitorování a hodnocení včetně zřízení Centra pro zjišťování výsledků vzdělávání (včetně informační a poradenské činnosti).

CERMAT má jako základ pro splnění své nové funkce k dispozici výsledky všech šetření, která proběhla v letech 2001-2005 na celostátním vzorku žáků v rámci cyklu programů Krok za krokem k nové maturitě, dále výsledky z výzkumných šetření probíhajících v letech 2004-2005 v 9. třídách a v 5. třídách.

Naznačená problematika si vyžaduje okamžité řešení některých úkolů tak, jak jsou uvedeny citovaném projektu SP KVALITA I. Cílem úkolu: Vzdělávání pedagogických a organizačních pracovníků v souvislosti s reformou maturitní zkoušky a s hodnocením v oblasti základního vzdělávání (dále jen VPOP) je připravit na základě požadavků CERMATu komplexní vzdělávací produkt jako systém povinných a volitelných modulů. Modulová struktura umožní, aby si každý účastník sestavil individuální studijní plán podle svého zaměření a zájmu. Pro získání osvědčení (certifikátu) o absolutoriu bude nutné absolvovat minimální stanovený počet modulů. Podkladem pro stanovení individuálních studijních plánů bude podrobně stanovená osnova modulů a vzorové průchody programem.

V této oblasti se otvírá široké pole pro spolupráci s vysokými školami vzdělávajícími budoucí učitele. Od září 2005 bude připravován pilot VPOP pro chemii ve vztahu k evaluaci na středních i základních školách.

[1] SP KVALITA I, MŠMT ČR, Praha 2005
[2] Vasileská M.,: CERMAT (spolupráce s VŠ v oblasti evaluace a DVPP), Sborník mezinárodní konference: Aktuálné vývojové trendy vo vyučování prírodních vied, Univerzita Trnava 2005 (v tisku)
[3] www.cermat.cz

4Po11

PROJEKTOVÉ VYUČOVANIE V EDUKAČNOM PROCESE CHÉMIE

Zuzana Vajcíková, Pavlína Gálusová a Kamil Cejpek

Katedra chémie, Fakulta prírodných vied, Univerzita Mateja Bela, Tajovského 40, 974 01Banská Bystrica, Slovenská republika,
e-mails: vajcikov@fpv.umb.sk, galusova@fpv.umb.sk, cejpek@fpv.umb.sk

Cieľom príspevku je navrhnúť ekoprojekty formou pracovných listov vhodných na doplnenie klasickej výučby chémie. Z pedagogických a psychologických výskumov posledného desaťročia vyplynulo nedostatočné osvojovanie poznatkov z chémie prostredníctvom tradičného vyučovania čo nás viedlo k myšlienke obohatiť vyučovací proces o nové metódy a formy vyučovania.

Projektové vyučovanie je definované v najnovšom pedagogickom slovníku ako „vyučovacia metóda, pri ktorej

sú žiaci vedení k riešeniu komplexných problémov a získavajú skúsenosti praktickou činnosťou a experimentovaním“[1, 2].

Projekty svojim charakterom okrem iného zasahujú aj do formovania environmentálneho vedomia a následne uvedomenia žiakov., upevňujú vedomosti, motivujú žiakov, zlepšujú pracovnú atmosféru na vyučovaní, rozvíjajú kreativitu a tímovú prácu. V rámci príspevku sa zaoberáme integráciou environmentálnych projektov s ekotoxikologickými aspektami do tematických celkov učiva chémie a projektom s názvom „Myslím - chránim - prežijem“ realizovaným na Gymnáziu Jozefa Gregora Tajovského v Banskej Bystrici. Projekt bol schválený MŠ Slovenskej republiky, ktorý v súčasnej dobe pokračuje.

V dnešnej dobe je projektové vyučovanie predmetom inovačných snáh v oblasti vyučovacích koncepcií. Projektové vyučovanie neodstraňuje tradičné vyučovanie, len prináša korekcie k jeho medzerám [3]. V súčasných podmienkach slovenského školstva je možné použiť projektové vyučovanie len ako doplnok, ktorý umožní prehlbovať a zvyšovať kvalitu vyučovacieho procesu. Jeho experimentálnym overovaním na základe získaných výsledkov ho vhodne začleniť do edukačného procesu chémie na školách.

[1] Průcha, J, Walterová, E., Mareš, J.: *Pedagogický slovník*. Praha: Portál, (1995)
[2] Kárová, V.: *Projektové vyučovanie*. In: Komenský, 112, č. 1/2, s. 26-28, (1997/98)
[3] Turek, I.: Inovácie v didaktike. Bratislava : MPC, (2004)

4Po12

VÝVOJOVÉ TRENDY VEDNÉHO ODBORU DIDAKTIKA CHÉMIE NA SLOVENSKU

Zuzana Vajcíková a Zuzana Višňovcová

Katedra chémie, Fakulta prírodných vied Univerzita Mateja Bela, Tajovského 40, 974 01 Banská Bystrica, Slovenská republika,
e-mails: vajcikov@fpv.umb.sk, visnovcova@fpv.umb.sk

Prirodzeným vyústením rozvoja školstva v priebehu 15.-16. st. na Slovensku bol vznik univerzít. Ich prudký rozmach ovplyvnil ďalší vývoj vedeckej chémie, výučbu chémie, neskôr i didaktiky chémie na vysokých školách pripravujúcich budúcich učiteľov. Vývojové tendencie tohto odboru nielen na Slovensku, ale i v iných krajinách sveta ovplyvnila najmä didaktická sústava chémie v Nemecku [1].

Rozvoj didaktiky chémie na Slovensku závisel od výchovno-vzdelávacieho využitia samotnej chémie a potrieb spoločenskej praxe. Jej počiatky súvisia s výučbou chémie na všeobecno-vzdelávacích školách v 18.-19. storočí. Postupne sa vyvíjala od empirického odboru k vedeckej disciplíne. Prvým názvom odboru bola metodika vyučovania chémie. Vyučovala sa už v roku 1912 na Filozofickej fakulte Pražskej univerzity. Jej ďalší vývoj bol odkázaný na dostupnú zahraničnú literatúru a vzhľadom na vtedajšiu spoločensko-politickú situáciu bol na dlhšiu dobu prerušený. Vlastný rozvoj výučby metodiky chémie na území Československa sa začal až po roku 1945. Dovtedy ako vyučovací predmet na vysokých školách prakticky neexistovala. Po roku 1946 sa stala prvýkrát povinným predmetom i súčasťou skúšok na novovzniknutých pedagogických fakultách. Postupne vzrástol aj počet vysokoškolských učiteľov, ktorí sa jej venovali ako novému vednému odboru. V priebehu 60-tych rokov minulého storočia došlo k zmene názvu odboru na *didaktiku chémie* a bol zahájený výskum v tejto oblasti. V 70-tych rokoch vzniklo veľké množstvo vysokoškolských skrípt zaoberajúcich sa problematikou didaktiky chémie. Dodnes je zaužívaný pre tento vedný odbor aj názov *teória vyučovania chémie* [2, 3].

[1] Višňovcová, Z.: *Vznik a vývoj chémie ako učebného predmetu na všeobecno-vzdelávacích školách a zavedenie výučby didaktiky chémie do slovenských vysokých škôl*. Písomná práca k dizertačnej skúške. Banská Bystrica : FPV UMB, s. 5, (2004).
[2] Vurm, V.: K historii učitelství chemie I. II. III. In: *Přírodní vědy ve škol*e. Roč. 39, 1987, s. 224-226, 262-264, 303-304.
[3] Kmeťová, J., Silný P.: Učebné texty z chémie a ich kompatibilita so vzdelávacím štandardom. In: Zborník z XII. konferencie *„Profese učitele a současná společnosť“*. Ústí nad Labem: PF UJEP, 2004, s. 38.

5Po01

VYUŽITÍ MIKROEXTRAKCE TUHOU FÁZÍ PRO STANOVENÍ SILIC V BYLINÁCH

Martin Adam, Anna Delijannisová, Aleš Eisner, Karel Ventura, Josef Královský

Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Katedra analytické chemie, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice, e-mail: Martin.Adam@upce.cz

Silice patří mezi velmi rozmanitou skupinu látek, o kterých lze říci, že jsou to směsi lipofilních ve vodě špatně rozpustných těkavých látek. Z chemického hlediska jsou silice terpenické uhlovodíky mající podobu bezbarvých kapalin. Jsou to sloučeniny těkající s vodní parou, čehož se využívá i při kvantitativní analýze jejich obsahu v bylinách. Lze říci, že stejně tak, jako lze jednotlivé byliny rozeznat podle vůně a jejich intenzity, lze tyto byliny rozlišit i podle celkového obsahu silic a jejich relativního zastoupení.

Silice lze analyzovat i po zakoncentrování z plynného prostoru nad vzorkem. Pro tento účel se jako perspektivní jeví technika mikroextrakce tuhou fází - SPME, která byla již dříve aplikovaná např. pro analýzu silic v listech jakonu či ve chmelu [1].

SPME je sorpčně-desorpční proces založený na ustavování rovnováhy mezi povrchem vzorku, headspace prostorem a povrchem vhodně zvoleného SPME vlákna. Úspěšné aplikaci této extrakční techniky však musí předcházet optimalizace jednotlivých extrakčních parametrů. Zachycené analyty jsou následně tepelně desorbovány v nástřikovém prostoru plynového chromatografu.

Práce byla provedena s finanční podporou grantových projektů Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR (projekt MSM0021627502) a Grantové agentury České republiky (projekt 203/05/2106).

[1] Adam, M., Juklová, M., Bajer, T., Eisner, A., Ventura, K.: J. Chrom. A, (2005), v tisku

5Po02

BIOLOGICKÁ AKTIVITA HUMINOVÝCH LÁTEK

Barbora Antošová, Josef Kozler, Jaromír Novák, Jaroslav Kubíček, Dorota Horová, Iva Vondrová

Výzkumný ústav anorganické chemie, a. s., Revoluční 84, 400 01 Ústí nad Labem, Česká republika. e-mail: barbora.antosova@vuanch.cz

Huminové látky (HS) jsou z hlediska své funkce významnou součástí humusu. Zdrojem HS pro průmyslové využití jsou kaustobiolity - rašelina, lignit a zoxidovaná hnědá uhlí, tzv. oxyhumolity. Jejich vlastnosti závisí na druhu zdroje a způsobu separace. HS se uplatňují v řadě oblastí, nejčastěji jako nespecifický stimulátor při pěstování kulturních rostlin. Pro hodnocení vhodnosti tohoto využití je třeba stanovit jejich biologickou aktivitu (BA) [1].

K tomuto účelu byla vyvinuta metoda založená na schopnosti HS ovlivňovat dlouživý růst kořenů rostlin. Hodnocení BA bylo provedeno měřením délky kořínků klíčících semen kukuřice seté umístěných v roztoku HS. Bylo získáno procentické vyjádření stimulačního efektu HS, připravených z oxyhumolitu z dolu Václav u Duchcova. Relativní přírůstky kořínků po 48 hodinách měly hodnotu 358 %, po 96 hodinách 198 % kontrolního vzorku. Výsledky byly statisticky významné.

Další provedené testy prokázaly, že biologická aktivita HS různého původu v závislosti na surovině a zpracování významně liší a že ne všechny HS jsou biologicky aktivní, některé působí i inhibičně. Dále bylo prokázáno, že použití příliš vysokých dávek nebo vysokých koncentrací HS může mít na rostliny při určitém způsobu použití inhibiční účinky. BA byla doporučena pro využití u výrobce HS [2].

V dalším období bude práce zaměřena na stanovení korelace BA a vybraných strukturních parametrů HS.

Práce vznikla v rámci řešení projektu ev. č. FT-TA/038, který byl realizován za finanční podpory ze státních prostředků prostřednictvím Ministerstva průmyslu a ob-chodu ČR.

[1] Sladký Z., Tichý V.: Applications of humus substances to overground organs of plants, Biologia Plantarum 1(1), str. 9-15, Praha (1959)

[2] Horová D., Novák J., Kozler J., Kubíček J., Madronová L., Šimon T.: Chem. Listy 97, 779, (2003)

5Po03

ANTIMICROBIAL ACTIVITY OF TEA LEAVES (CAMMELIA SINENSIS L.) AND THEIR HOT WATER EXTRACTS

Jozef Augustín, Daniela Hudecová*, Jarmila Hojerová

*Department of Food Technology, *Department of Biochemistry and Microbiology, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak Univerzity of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia, e-mail: jozef.augustin@stuba.sk*

In this study autors observed the effects of tea leaves (*Camellia sinensis L.*) and their hot water extracts on the inhibition of growth of bacteria (*Staphylococcus aureus, Escherichia coli*), filamentous fungi (*Rhizopus oryzae, Aspergillus fumigatus, Penicillium spp.*), dermatophytic fungi and one representative of yeast (*Candida parapsilosis*). The tested samples of tea leaves were selected in regard to their different technological preparation (Assam Green - green, non-fermented; Formosa Oolong - semi-fermented; Assam Blend - black, fully fermented and Pu-Erh - repetendly fermented) as wel as their place of origin and import from various producing contries.

From the series of experiments it follows that the highest inhibitory activity was in the group of hot water extracts especially in sample no.5 (Pu-Erh), when the growth inhibition of *Staphylococcus aureus* reached around 50% and in case of *Escherichia coli* it even exceeded 60%.

Lowest inhibition activity was observed with non-fermented sample of green tea leaf (Assam Green) and further with semi-fermented (Oolong Formosa) and fermented tea (Assam Blend), when the growth inhibition of *Staphtlococcus aureus* and *Escherichia coli* was around 15% and from 25% to 40% respectively. Similar percentual inhibition boundaries for *Staphylococcus aureus* where reported by others e.g. Seiki and Ito, Yam et al., Hamilton-Miler and Shah. The result show that the hot water extracts have a higher percentage of inhibition compared to the tea leaves alone. The maximal growth inhibition was observed with *Rhizopus oryzae* and *Penicillium spp.* both being above 90%. Generally, from the obtaineresult it can be staded that the hot water extracts of tea leaves have highest antimicrobial activity with all tested samples. We suppose that many more active substances contained in individual samples are extracted into hot aqueous environment compared to adding tea leaves alone. There is a high probability that also their activity increased in this way.

The aim of this work was to test some selected types of tea leaves from the distribution network and to assess their antimicrobial potential. This property of tea has also a practical meaning and in the future can give rise to new possibilities and or an alternative utilization in practice.

5Po04

METODY EXTRAKCE ISOFLAVONOIDŮ Z ROSTLIN

Tomáš Bajer, Zdeňka Zdráhalová, Martin Adam, Soňa Řezková a Karel Ventura

Katerda analytické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice, Česká republika, e-mail: ingkojer@post.cz

Isoflavonoidy patří mezi rozsáhlou skupinu flavonoidů, sekundárních metabolitů široce rozšířených v rostlinné říši. Společně s lignany, kumestany a stilbeny patří do skupiny fytoestrogenů, což jsou fenolické látky vykazující určitou estrogenní aktivitu. Fytoestrogeny jsou exoestrogeny, stejně jako řada škodlivin v životním prostředí, avšak narozdíl od nich mají účinky na organismus většinou příznivé. Nejbohatším zdrojem isoflavonoidů je soja, dalšími vý-znamnými zdroji jsou jetel a vojtěška. Vyskytují se také v ně-kterých léčivých rostlinách, jako např. chmel, jakon atd.

Pro extrakci isoflavonoidů z rostlinného materiálu byly použity tyto extrakční techniky: extrakce nadkritickými tekutinami (SFE - Supercritical Fluid Extraction), vysokotlaká extrakce rozpouštědlem (PSE - Pressurised Solvent Extraction), extrakce v ultrazvukové lázni (USE - Ultrasonic Extraction) a extrakce na tuhé fázi (SPE - Solid Phase Extraction), která byla použita pro přečištění získaných extraktů.

Pro nalezení vhodných podmínek extrakce byla provedena experimentální optimalizace použitých extrakčních technik. Pro separaci byla použita metoda vysokoúčinné kapalinové chromatografie s UV detekcí. Separace byla prováděna v systému s reverzními fázemi na koloně se sorbentem C18. Jako mobilní fáze byla použita směs acetonitril-voda v různých poměrech. Identifikace isoflavonoidů ve vzorcích byla prováděna na základě porovnání retenčních časů a pomocí metody standardního přídavku.

Práce byla provedena díky finanční podpoře grantového projektu Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR (projekt MŠM 0021627502), interního grantu Univerzity Pardubice (3330/20/FG350002) a projektu GAČR 203/05/2106.

5Po05

PHOTOCATALYTIC DEGRADATION OF AZO DYES IN THE PRESENCE OF TiO_2 AQUEOUS SUSPENSION

Wojciech Baran, Wladyslaw Wardas, A. Makowski

Departament of General and Analytical Chemistry, Silesian Medical University, 41-200 Sosnowiec, Jagielońska 4, Poland, e-mail: bw.xxl@poczta.fm

The efficient method of removing of toxic pollution in environment is its photocatalytic degradation from TiO_2/UV [1]. The method is based on free-radical reaction initiated by light. Its limiting stage is probably the adsorption of substrate on surface of catalyst. That is why the kinetics of the reaction is described by Langmuir-Hinshelwood's equation. In this case, there is possibility of interference of adsorption and decreasing of exposition of catalyst on radiation during illumination of mixtures of different substances.

The aim of our paper was to determine the dependence between initial concentration of selected dyes and rate constant of their photocatalytic degradation as well as determination of changes that appear in the dependences in solutions containing the mixtures of dyes.

During studies there were used such solutions of anionic dyes like Acid Orange 7, Acid Back 1 and cationic Basic Orange 66. They were illuminated by UV radiation in the presence of suspension of TiO_2. Rate constant of degradation of the examined dyes was determined on the base of spectrophotometric determinations and HPLC. On the surface of catalyst it was visible the adsorption and the only one adsorbed cationic dye. However, the dependences determined for each of the dyes were the same like in Langmuir-Hinshelwood's equation.

In the solution containing a mixture of dyes there was observed the decrease of rate constant of their degradation in a degree which is dependant on their mutual mass ratio. At the same time it was stated that the rate constant of degradation of dyes in the conditions are inversely proportional to absorbance of radiation used during illumination of their solutions.

[1] Blake D.M.: Technical Report of National Renewable Energy Laboratory, U.S. Depatment of Energy Laboratory, Update Number 4, 2001

5Po06

THE INFLUENCE OF CHEMICAL NATURE AND ABSORBANCE OF SOLUTIONS ON PHOTODEGRADATION OF DYES IN THE PRESENCE OF TiO_2

Wojciech Baran, Wladyslaw Wardas, A. Makowski

Departament of General and Analytical Chemistry, Silesian Medical University, 41-200 Sosnowiec, Jagielońska 4, Poland, e-mail: bw.xxl@poczta.fm

The process of photocatalytic degradation of dyes is conducted from TiO_2/UV and it is used to remove them from water solutions [1] and to estimate fastness of dyes on light [2]. The deciding influence on the process of degradation should have an ability of dye to adsorption on TiO_2 particles. However, the illuminated solutions can absorb the part of radiation and as a result the activity of catalyst and reaction-rate constant are decreasing.

The aim of the paper was to study if the chemical character of dyes and absorption of radiation by their solutions, influence on effects of their photocatalytic degradation. The photocatalytic reaction was conducted in the presence of TiO_2 suspension and it was used illumination by radiation UV (λ=366nm). For dyes selected to study there were determined: rate constant of their photocatalytic degradation, efficiency of their adsorption and absorbance of their solutions at λ=366nm.

It was stated that:

- only cationic dyes can be measurably adsorbed on the surface of particles of photocatalyst. Simultaneously, their photocatalytic degradation is faster than degradation of anionic dyes,
- the change of chemical nature of dye particle from inert on cationic makes intensification of its adsorption and essential acceleration of photodegradation,
- anthraquinonic dyes probably are less susceptible to phoocatalytic degradation conducted in the presence of TiO_2 from azo and triphenylmethane dyes,
- There is a linear correlation between absorbance of illuminated solution of dyes and reverse of rate constant of degradation of the dyes.

[1] Blake D.M.: Technical Report of National Renewable Energy Laboratory, U.S. Depatment of Energy Laboratory, Update Number 4, 2001

[2] Zhan H. And Tian H.: Dyes and Pigments, 37, 249-254, 1998

5Po07

TOXICITY AND BIODEGRADABILITY OF SULFONAMIDES AND PRODUCTS OF THEIR PHOTOCATALYTIC DEGRADATION IN AQUATIC SOLUTIONS

Wojciech Baran, Jolanta Sochacka, Władysław Wardas

Department of General and Analytical Chemistry, Faculty of Pharmacy, Medical University of Silesia, Jagiellonska St 4, 41-200 Sosnowiec, Poland, chemogan@infomed.slam.katowice.pl

Biologically active synthetic substances show a long life-time in the environment, a possibility of accumulation in a food chain and also a resistance to biological methods used during a sewage treatment. The examples of these substances are drugs used in human and veterinary medicine. After the application they are excreted from the body non-metabolized but also as the biotransformation products. The expired and unused drugs from the households are also introduced into sewage.

The aim of the study was to evaluate a possibility of application the photocatalytic process in a sulfonamides degradation in water solutions.

What was examined:

- photocatalytic degradation of sulfacetamide (SA), sulfathiazole (ST), sulfametoxazole (SM) and sulfadiazine (SD) in water solutions after their exposure to UV radiation λ_{max} 366nm with TiO_2 catalyst.

What was determined:

- toxicity of sulfonamides in aquatic systems relative to green alga Chlorella vulgaris, expressed as the effective concentration EC50(0-48) [1, 2],
- biological activity of the sulfonamides and/or products of their photocatalytic degradation relative to Chlorella vulgaris,
- susceptibility of the sulfonamides and their photodegradation products to microbiological degradation, expressed as BOD5 (biochemical oxygen demand).

The following conclusions were formulated based on the obtained results:

- all of the examined sulfonamides undergo photocatalytic degradation,
- all of the examined sulfonamides in the initial solutions were toxic relative to *Chlorella vulgaris*; their toxicity increased in a row of SA<ST<SM<SD,
- all of the examined sulfonamides were resistant to biodegradation, what was confirmed by very low BOD5 values of their initial solutions,
- toxicity of the sulfonamides degradation products was significantly lower than in initial solutions and was dependent to exposure time and degradation rate,
- photocatalysis products, as distinguished from the initial sulfonamides, are biodegradable, what was confirmed by BOD5 increase of the irradiated solutions.

[1] OECD Guidelines for the testing of chemicals, 201 (1993).

[2] ISO 8692, Geneve, Switzerland (1989).

5Po08

VÁZÁNÍ KOJOVÉ KYSELINY NA CHITOSAN

Blafková P., Synytsya A., Čopíková J., Uher M.*

Ústav chemie a technologie sacharidů, FPBT, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28, Praha 6 - Dejvice, Česká republika, e-mail: blafkovp@vscht.cz
**Ústav organické chemie, FCHPT, STU Bratislava, Radlinského 11, 813 68 Bratislava 1, Slovenská republika*

Kyselina kojová je sekundárním metabolitem hub rodů *Aspergillus, Acetobacter a Penicillium* [1]. Tato kyselina je používána jako potravinářské aditivum k prevenci enzymatického hnědnutí. V kosmetice se využívá její schopnosti inhibovat tvorbu melaninu. Používá se v přípravcích s bělícími účinky na pleť, v prevenci proti opálení a na ochranu pokožky před UV zářením [2]. Polysacharid chitosan a jeho deriváty jsou také široce používány v kosmetice, hlavně jako součást pleťových krémů. Chitosan může působit jako účinné zvlhčovadlo pleti.

Cílem této práce je chemické vázání kojové kyseliny na chitosan. V prvním případě byla použita reakce kyseliny chlorkojové s chitosanem v prostředí dimethylsulfoxidu. Ve druhém případě bylo využito skutečnosti, že chitosan a kojová kyselina jsou známy svou schopností vytvářet komplexy s kovy [2, 3]. Nejprve bylo na chitosan navázáno železo(III), poté byla na vzniklý komplex navázána kyselina kojová. Reakce probíhala ve vodném roztoku. Byly izolovány komplexy chitosan-Fe, kojová kyselina-Fe a chitosan-Fe-kojová kyselina. Výsledné produkty byly analyzovány FT-IR spektroskopií a organickou elementární analýzou. V obou případech bylo navázaní kyseliny účinné. FT-IR spektra prokázala přítomnost vázáné kojové kyseliny v produktech. Z obsahů N a C byl stanoven obsah chitosanu v komplexech. Stupeň substituce byl 41-46 % (N-derivát) a 17 % (přes Fe).

[1] Burdock G. A., Soni M. G., Carabin I. G.: *Regulatory Toxicology and Pharmacology, 33*, 80-101, (2001)
[2] Uher M., Chalabala M., Čižmárik J.: *Česká a slovenská farmacie, 6,* 288-298, (2000)
[3] Varma A. J., Deshpande S. V., Kennedy J. F., *Carbohydrate Polymers, 55*, 77-93, (2004)

5Po09

NUTRITIONAL AND COOKING QUALITY OF WHEAT BRAN ENRICHED PASTA

Tatiana Bojňanská, Zdenka Muchová

Department of Storing and Processing Plant Products, Faculty of Biotechnology and Food Sciences, Slovak University of Agriculture in Nitra, Tr. A. Hlinku 2, 949 76 Nitra
Tatiana.Bojnanska@uniag.sk

Five types of dried pasta were obtained from 100 % common wheat flour and bran/flour mixture: 50% (E), 30% (D), 20% and 5% bran. Chemical analyses to determine nutritive values of pasta such as amino acid content, fiber and minerals content have been carried out. Nutritive value of pasta obtained from bran/flour mixture was higher than control pasta: the proportion of AA has increased in proportion with the bran addition, the most significantly with AA: *arginine, lysine*, aspartic acid, glycine and *histidine*. Wheat bran enriched pasta contained significantly higher portion of fiber: 3.5-32 times more lignocelullose and 1.5-6.5 times more hemicellulose than in control pasta. Wheat bran enriched pasta showed a higher portion of minerals (1.3-4.7 times). As far as macronutrients are concerned, the most important is the increasing of the content of calcium (1.1-2.0 times), phosphorus (1.3-4.2 times) and magnesium (1.3-4.2 times).

Cooking tests were performed under standard conditions, cook time was 8-10 min, cooking loss averaged 9.8% (≤2.2) for bows with bran and 6.0% for bows without bran. Bows obtained from bran/flour mixture showed lower values of the titration acids amount: in E and D the value exceeded the limit given by the legislation.

The research was supported by a State research and development sub-programme „Food quality and safety“? 2003SP270280E010280E01.

5Po10

ANTIOXIDAČNÁ AKTIVITA SLOVENSKÝCH ODRÔD OVSA SLEDOVANÁ ABTS A EPR TECHNIKOU

Lucia Brindzová, Peter Rapta, Mária Takácsová

Fakulta chemickej a potravinárskej technológie Slovenskej technickej univerzity, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, e-mail: lucia.brindzova@stuba.sk

Ovos siaty (Avena sativa L.) zaraďujeme medzi významné druhy cereálií a to nielen vzhľadom na zastúpenie výživovo dôležitých látok, ako β-glukány, vitamíny, minerálne látky či esenciálne aminokyseliny a mastné kyseliny, ale aj zlúčenín s antioxidačným účinkom, ktoré zneškodňujú voľné radikály a ktoré by vo významnej miere mohli nahradiť syntetické antioxidanty. Z prírodných antioxidantov sú v ovse v najvyšších koncentráciách najmä tokoferoly a fenolové zlúčeniny.

Celková antioxidačná kapacita (CAK) a radikál zhášajúca kapacita bola meraná vo vzorkách slovenských odrôd ovsa. Pri skúmaní radikál zhášajúcich a antioxidačných účinkov vzoriek sa použil vyselektovaný najvhodnejší systém na sledovanie antioxidačných účinkov DMSO supernantantov a to rozklad $K_2S_2O_8$, ktorý bol použitý ako zdroj kyslíkom centrovaných radikálov (.OH, .OR, .OOR) a uhlíkom centrovaných radikálov (.R). Ako spinový lapač bol použitý DMPO (5,5-dimetyl-1-pyrolín-N-oxid). CAK bola sledovaná spektrofotometrickou metódou založenou na eliminácii ABTS katión radikálu. Ako štandard bol použitý vo vode rozpustný vitamín E-analóg (trolox).

Rozdiely v CAK medzi vzorkami neboli štatisticky významné. Výsledky CAK boli porovnané z výsledkami z EPR

techniky. Radikál zhášajúca kapacita hodnotená EPR technikou spinových lapačov klesala v rade DETVAN>ZVOLEN>PS-90>SV-5>PS-100. Na záver sme porovnali antioxidačnú a radikál zhášajúcu účinnosť ovsa s inými obilninami. Najlepšiu CAK vykazovala pohánka, kým najlepšie radikál zhášajúce účinky mal ovos.

5Po11

ÚRODA A OBSAH MAKROPRVKOV V KORENI PETŽLENU OBYČAJNÉHO PO APLIKÁCII FENOLICKÝCH ZLÚČENÍN

Judita Bystrická, Mária Timoracká, Janette Musilová, Tomáš Tóth, Pavol Trebichalský

Katedra chémie, Fakulta biotechnológie a potravinárstva, Slovenská poľnohospodárska univerzita, Tr. A. Hlinku 2, 949 76 Nitra, e-mail: bystrick@afnet.uniag.sk

Koreňová zelenina patrí medzi najviac rozšírené zeleniny, ktoré sa pestujú kvôli dužinatým koreňom. Vysoko sa hodnotí pre jej nízky energetický potenciál, najmä pre vitamíny, minerálne, éterické a aromatické látky [1]. Minerálne látky aj v malom množstve sú pre ľudský organizmus nepostrádateľné, aj koreňová zelenina je ich zdrojom a naviac sa v nej vyskytujú v ľahko prijateľných zlúčeninách [2]. Cieľom práce bolo vyvinúť rastovo-regulačnú synergickú zmes, ktorá po foliárnej aplikácii pozitívne ovplyvní úrodu a kvalitu petržlenu obyčajného.

Zvýšenie úrody a vylepšenie kvalitatívnych parametrov koreňovej zeleniny sa popri klasických intenzifikačných opatreniach dá dosiahnuť aj aplikáciou vhodných fenolických látok. Fenolické substancie modifikujú aktivitu jednoduchých hormónov a významom sú nešpecifické rastové regulátory. Pôsobia podľa štruktúry inhibične alebo stimulačne na tvorbu koreňov, hľúz, obdobie stárnutia a odpočinku, proti mrazu a chorobám.

Použité prípravky prejavili regulačné účinky na príjem živín. Stanovené obsahy makroprvkov sa pohybovali na úrovni kontroly alebo sa mierne znižovali, ale pomer Mg/Ca a K/Na bol priaznivý, čo môže byť vítané ľuďmi s hypertenziou a pre pacientov so srdcovo-cievnymi ochoreniami.

Minerálne látky vykonávajú niekoľko funkcií nevyhnutných pre normálnu činnosť buniek a chod celého organizmu. Spolu s inými zložkami koreňovej zeleniny pôsobia na imunitný systém človeka a chránia ho pred nebezpečnými civilizačnými ochoreniami.

[1] Hegedüsová, A. : Individuálna variabilita obsahu dusičnanov v koreňoch mrkvy. Záhradníctvo, 3, 1989, s. 117
[2] Troníčková, E. Zelenina. Praha : Artia, 1985. 258 s.

5Po12

RADIAČNÍ REDUKCE Co^{2+} a Ni^{2+} IONTŮ VE VODNÝCH ROZTOCÍCH

Václav Čuba[a], Milan Pospíšil[b], Petr Kovařík[b], Viliam Múčka[b], Rostislav Silber[b]

[a]ČVUT v Praze, Centrum pro radiochemii a radiační chemii, Břehová 7, Praha 1, 115 19; e-mail: vaclav.cuba@fjfi.cvut.cz
[b]ČVUT v Praze, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, Břehová 7, Praha 1, 115 19

Kobalt a nikl patří mezi toxické těžké kovy, ohrožující životní prostředí i zdraví člověka. Odstranění jejich iontů z odpadních a povrchových vod, ve kterých se tyto kovy nacházejí převážně v důsledku průmyslového znečištění, je tedy nutné věnovat značnou pozornost. Perspektivní metodou likvidace těchto kontaminantů je jejich radiační redukce na metalickou formu, probíhající ve vodném prostředí za přítomnosti vychytávačů oxidujících produktů radiolýzy vody. Vyredukovaný kov je možno z roztoku následně separovat (centrifugace, ultrafiltrace, apod.).

Tato práce byla prováděna za účelem předběžného studia možností radiační techniky při odstraňování kobaltu a niklu z vodných roztoků a optimalizace některých parametrů procesu. Experimenty byly prováděny v návaznosti na předchozí studie, zabývající se radiační redukcí dalších kovů (1,2).

Vodné roztoky $Co(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ a $Ni(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ o koncentracích kovových iontů v rozsahu 50 - 200 mg/l a s HCOOK o koncentraci 10^{-2} mol/l jako vychytávačem byly zataveny do tenkostěnných skleněných ampulí a ozařovány na vysokofrekvenčním lineárním urychlovači elektronů LINAC 4-1200 o energii elektronů 4,5 MeV a dávkovém příkonu 0,5 - 1 kGy/s. Stanovení koncentrace zbytkového podílu kovových iontů ve vodném prostředí po ozáření byla provedeno metodou AAS. Bylo zjištěno, že za daných podmínek dochází při dávce 70 kGy až k 90% redukci Co^{2+} na kovovou formu. V případě Ni^{2+} je to při dané dávce jen asi 60 % pokles koncentrace iontů v roztoku. Velikost vyredukovaného podílu silně závisí zejména na koncentraci vychytávače, množství rozpuštěného kyslíku a počáteční koncentraci kovových iontů.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 104/04/P071.

[1] Pospíšil M., Múčka V., Čuba V., Silber R., Hejnová P., Dolanský J., *6th International Sympozium and Exhibition Environmental Contamination in Central and Eastern Europe and the Commonwealth of Independent States*, 5 pages, (2003).
[2] Čuba V., Pospíšil M., Hejnová P., Múčka V., Silber R., *Sborník z mezinárodní konference Odpadové vody 2004*, s. 285-290, (2004).

5Po13

VLIV TUHÝCH PROMOTORŮ (KOVOVÉ OXIDY) NA RADIAČNÍ ODSTRAŇOVÁNÍ OLOVA A KADMIA Z VODNÝCH ROZTOKŮ

Barbora Drtinová, Milan Pospíšil, Václav Čuba*

ČVUT, FJFI, Katedra jaderné chemie
**Centrum pro radiochemii a radiační chemii ČVUT*
Břehová 7, 115 19 Praha 1, e-mail: drtinova@fjfi.cvut.cz

Vzhledem k pokračující kontaminaci životního prostředí těžkými kovy nacházejícími se v průmyslových i komunálních odpadních vodách jsou vyvíjeny ekologicky a ekonomicky výhodnější alternativy konvenčních postupů jejich likvidace. Řešením se jeví využití ionizujícího záření, založené na radiační redukci iontů těžkých kovů z vodného prostředí, s důrazem na dosažení maximálního radiačně chemického výtěžku G(-Mn^+) při co nejnižší aplikované dávce.

V předchozí práci bylo provedeno podrobné studium vlivu základních parametrů rozšířené o výzkum tuhých promotorů na bázi sorbentů [1]. Předložený příspěvek shrnuje výsledky studia další skupiny modifikátorů - kovových oxidů CuO, Cu_2O, TiO_2, γ-Al_2O_3 a NiO. Vzorky o výchozí koncentraci 100 mg.l^{-1} iontů Pb^{2+} a Cd^{2+} ve vodných roztocích byly ozařovány za stálého míchání v zatavených ampulích urychlenými elektrony (4,5 MeV) dávkovou rychlostí 0,5 a 1 kGy.s^{-1}, resp. K výraznějšímu nárůstu účinnosti radiační redukce iontů Pb^{2+} došlo pouze v systému s přídavkem Cu_2O, kde byl jako lapač .OH radikálů použit HCOOK. Účinnost nezávisí na navážce promotoru, roste s rostoucí koncentrací HCOOK (10^{-3} a 10^{-2} mol.l^{-1}) a lze ji zvýšit deaerací N_2O. Radiačně redukční efekt se v přítomnosti Cu_2O projeví i v systému bez vychytávače, dochází k 50% redukci olova, téměř nezávisle na navážce promotoru. U kadmia se neprojevil žádný pozitivní efekt při přídavku těchto modifikátorů.

[1] Pospíšil M., Múčka V., Čuba V., Drtinová B., Silber R., Hejnová P.: Chem. Listy 98, 574-575 (2004).

5Po14

BIOTRANSFORMACE MONOTERPENICKÝCH SMĚSÍ

Marcela Dvořáková*, Irena Valterová, Tomáš Vaněk

**Katedra organické a jaderné chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Albertov 6, Praha 2*
Ústav organické chemie a biochemie, Akademie věd České republiky, Flemingovo nám. 2, Praha 6

Monoterpenické směsi se získávají z rostlin destilací s vodní parou. Používají se v řadě odvětví a jsou základním zdrojem jednotlivých monoterpenů. Monoterpenické směsi obsahují zejména monoterpenické alkeny, jejichž biotransformací lze získat oxidované monoterpeny, které se často používají jako dochucovadla a složky parfémů.

Všechny předchozí studie zabývající se biotransformací monoterpenů jsou věnovány pouze studiu biotransformace jednotlivých monoterpenů a nikoli jejich směsí, tím je naše studie výjimečná.

Naše studie se zabývá biotransformací terpentýnu pomocí *in vitro* kultur vyšších rostlin. (Terpentýn je monoterpenická frakce pryskyřice jehličnanů jejímiž hlavními složkami jsou α-pinen, β-pinen, 3-karen a limonen.) Soustředí se na identifikaci produktů biotransformace, zjištění závislosti relativního zastoupení produktů ve směsi v průběhu biotransformace i určení absolutních kvantitativních výtěžků hlavních produktů.

Bylo zjištěno, že hlavní produkty biotranformace směsi monoterpenů odpovídají produktům biotransformace jednotlivých monoterpenů, které jsou ve směsi obsaženy. Hlavními produkty biotransformace jsou myrtenol, trans-pinokarveol, *trans*-verbenol a verbenon. Relativní zastoupení těchto produktů v průběhu biotransformace se mění v závislosti na výchozí koncentraci terpentýnu.

Poděkování: Studie je podporována projektem 926.10

5Po15

STANOVENÍ ADITIV EXPLOZIVNÍCH MATERIÁLŮ VE VZORCÍCH ŽIVOTNÍHO PROSTŘEDÍ

Eisner Aleš, Chalánková Jana, Ježová Věra, Adam Martin, Ventura Karel

Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická,
Katedra analytické chemie,
Nám. Čs. Legií 565, 532 10 Pardubice,
e-mail: ales.eisner@upce.cz

Trinitrotoluen [1] a nitroglycerin [2] jsou dosud velmi používané chemikálie v důsledku čehož dochází ke značné kontaminaci vody a půdy v místech jejich výroby, zpracování, manipulace a likvidace. TNT se používá k přípravě tavitelných vojenských směsí, je součástí amonledkových trhavin a je výchozí surovinou pro výrobu dalších dusíkatých sloučenin. Nitroglycerin se používá na výrobu průmyslových trhavin, dynamitů a jako přísada do tuhých pohonných hmot. Expozice organismu těmito sloučeninami může vzniknout vdechnutím, absorpcí kůží či sliznicemi. Nutnost stanovení těchto explosiv a jejich biodegradačních produktů souvisí s jejich toxicitou a trinitrotoluen je dokonce podezřelý mutagen.

Nitrotolueny (trinitrotoluen a dinitrotolueny) byly stanovovány ve vzorcích půd po zrychlené extrakci rozpouštědlem. Extrakty byly analyzovány pomocí GC 17A s hmotnostním detektorem QP 5050A (Shimadzu) na koloně Equity 5MS (30m x 0,25 mm s 0,25µm filmem). Nejdříve byla provedena optimalizace na uměle kontaminovaných vzorcích půdy a pak byla provedena analýza vzorků půd odebraných z okolí výrobny explozivních materiálů. Ve všech reálných vzorcích byly nalezeny zkoumané nitrotolueny.

Pro stanovení nitroglycerinu a etylenglykoldinitrátu z vodných vzorků bylo použito SPE s následnou HPLC/UV analýzou (ECOM). Nejdříve bylo otestováno 10 kolonek na uměle připraveném vzorku vody. Byla nalezena nejvhod-

nější kolonka pro tento typ látek a eluční rozpouštědlo. Za těchto podmínek pak byly analyzovány vzorky reálných vod ze stejné lokality jako vzorky půd používaných pro předchozí měření.

Práce byla provedena díky finanční podpoře grantových projektů MSMT 0021627502 a FRVS 1932/2005.

[1] J.C. Pennington, J.M. Brannon, *Thermochimica Acta*, 163-172, (2002)
[2] X. Zhao, J. Yinon, *J. Chromatogr. A, 977*, 59-68, (2002)

5Po16

THE USE OF THE CARROTS FOR OBTAINING OF CAROTENOIDS CONCENTRATE FOR FOOD INDUSTRY

Martina Fikselová, Helena Frančáková

Katedra skladovania a spracovania rastlinných produktov, Fakulta biotechnológie a potravinárstva, SPU Nitra, Tr. A. Hlinku 2, 949 76,
e-mail: Martina.Fikselova@uniag.sk

On the basis of our results of carotenes contents of the carrots (*Daucus carota, L.*) five carrots varieties with higher levels of carotenes were selected. Carrot varieties (Napa F1, Nevis F1, Idaho F1, Florida F1, Kathmandu F1) were cultivated under different soil-climatic conditions in Slovakia. Carotenes contents ranged from 11.3 to 26.3 mg.100g^{-1}.

According to the highest carotenes levels and other properties (form of the roots, yield), varieties Nevis F1 and Florida F1 were laboratory tested for extraction velocity. Samples were examined after harvest, after cold storage (stored at 5°C) and after freezeing. Extraction velocity of carotenes was observed at different temperatures (20 °C, 40 °C and 60 °C) in ethanol solution.

In connection with the technology of preparation of carotenoids concentrate from carrots has been found that solubility and recovery of carotenes depend on genotype, temperature and the time of extraction as well as the treatment of sample (freezing, storage). We can conclude that the highest extraction velocity and recovery of carotenes was from frozen samples at 60 °C and the time 3-4 hours.

Carotenoids concentrate we used as natural dyestuff for application to the pasta to gain better sensory and nutritional quality of pasta products.

5Po17

VÝZNAM A STANOVENIE CEREÁLNYCH BETA-GLUKÁNOV

Alena Gajdošová, Bernadetta Hozová

Katedra výživy a hodnotenia potravín, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie Slovenskej technickej univerzity, Radlinského 9, 812 37 Bratislava,
e-mail: alena.gajdosova@stuba.sk

Ľudské telo potrebuje pre svoju správnu funkciu množstvo rozmanitých látok, napr. esenciálne aminokyseliny, niektoré vitamíny a minerálne látky, ktoré musia byť telu pravidelne dodávané. Okrem týchto esenciálnych zložiek existuje však aj množstvo zlúčenín, ktorých príjem pre človeka nie je nevyhnutný, ale ich konzum priaznivo vplýva na stav organizmu. Medzi takéto látky možno zaradiť aj beta-glukány. Podľa experimentálnych a nie-ktorých klinických štúdií sa glukány vyznačujú antibakte-riálnymi, antivírusovými a imunomodulačnými vlastno-sťami využiteľnými v prevencii a terapii v humánnej medicíne, pozitívne ovplyvňujú hematopoézu, majú rádioprotektívny a antimutagénny účinok. V poslednom čase glu-kány priťahujú záujem z dôvodu ich antikoagulačného a proti-nádorového pôsobenia.

Na základe získaných informácií čerpaných z literatúry v oblasti medicíny i potravinárskeho výskumu sme sa v modelovom experimente zamerali na stanovenie obsahu (izoláciu a detekciu) nerozpustného beta-glukánu z rôznych druhov obilnín (ovos, pšenica, jačmeň, proso) a pseudo-obilnín (pohánka, láskavec) modifikovanou metódou izolácie a adjustácie fungálneho beta-(1,3)-glukánu podľa KUNIAKA (1992) [1], s využitím hydrolytických účinkov fungálnej alfa-amylázy (Fermizyme P300). Výsledky ukázali, že niektoré druhy obilnín (najmä ovos), sú vďaka vysokým obsahom nerozpustného beta-glukánu vhodným základom pre výrobu funkčných potravín.

[1] Kuniak, Ľ., Augustín, J., Karácsonyi, Š. a kol.: Spôsob izolácie a adjustácie fungálneho beta /1,3/ glukánu. Patentový spis č. 276 192, 1992.

5Po18

STANOVENIE STUPŇA KONTAMINÁCIE V CUKROVARNICKÝCH ŠŤAVÁCH MERANÍM OBSAHU KYSELINY MLIEČNEJ

Lucia Güllová, Michala Jancurová., Marta Kostičová, Alexander Dandár

Katedra potravinárskej technológie Fakulty chemickej a potravinárskej technológie STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovenská republika,
e-mail: lucia.gullova@stuba.sk

Počas extrakcie surovej šťavy dochádza k stratám cukru, a to hlavne vplyvom mikrobiálnej činnosti. Preto včasná identifikácia stupňa mikrobiálnej kontaminácie je

základným predpokladom zníženia neznámych strát počas výroby cukru.

Cieľom našej práce bolo overiť rôzne metódy stanovenia kyseliny mliečnej vo vzorkách difúznej šťav, rezkolisovej vody a v v šťavách z 1. a 3. komory extraktora ako hlavného produktu rozkladu sacharózy - enzymatické stanovenie množstva kyseliny L- a D- mliečnej stanovené prístrojom Microzym, stanovenie kyseliny L- a D- mliečnej pomocou enzýmových testov a stanovenie celkovej kyseliny mliečnej kapilárnou izotachoforézou.

Prístroj Microzym je enzymatický biosenzor založený na ampérometrickej detekcii. Pracuje na základe spojenia medzi enzýmom a elektrochemickým senzorom. Vzorka sa dávkuje medzi elektródy a substrát, difunduje cez membránu a reaguje s enzýmom. Prebiehajúce reakcie produkujú mikroprúd, ktorý je úmerný koncentrácii substrátu.

Princípom stanovenia kyseliny L- a D- mliečnej enzýmovými testami je to, že v prítomnosti (L-, D-) laktát dehydrogenázy sa kyselina (L-, D-) mliečna oxiduje nikotínamidadeníndinukleo-tidom na pyruvát. Rovnováha reakcií je na strane laktátu. Zachytením pyruvátu následnou reakciou katalyzovanou enzýmom glutamátpyruváttransaminázou v prítomnosti L- glutamátu sa rovnováha posúva na stranu pyruvátu a NADH. Množstvo NADH je v stechiometrickom pomere k množstvu kyseliny L- a D- mliečnej. Nárast NADH sa stanoví jeho svetelnou absorpciou pri 340 nm.

Kapilárna izotachoforéza patrí medzi elektroforetické techniky. Je založená na migrácii nabitých častíc v jednosmernom elektrickom poli. Špecifikom tejto metódy je prítomnosť ostrých zónových rozhraní oddeľujúcich odseparované zóny jednotlivých zložiek vzorky, ktoré migrujú za sebou rovnakou rýchlosťou. Bežná chyba kvantitatívneho stanovenia je 1 až 3 %.

Priemerný obsah kyseliny mliečnej stanovený prístrojom Microzym je v 1. komore extraktora 438,94 mg/l, v 3. komore 228,53 mg/l, v difúznej šťave 370,74 mg/l a v rezkolisovej vode 101,89 mg/l. Obsah kyseliny mliečnej nameraný pomocou enzýmových testov je v 1. komore 538,82 mg/l, v 3. komore 351,83 mg/l, v difúznej šťave 400,01 mg/l a v rezkolisovej vode 208,35 mg/l. Kapilárnou izotachoforézou je stanovený priemerný obsah kyseliny mliečnej v 1. komore na 495,41 mg/l, v 3. komore na 239,46 mg/l, v difúznej šťave na 385,35 mg/l a v rezkolisovej vode na 73,48 mg/l.

Kapilárna metóda je považovaná za najpresnejšiu metódu v meraní obsahu organických kyselín, avšak v prevádzke cukrovaru sa nepoužíva. Nám poslúžila na zistenie, ktorá enzýmová metóda je presnejšia. Na základe výsledkov sme zistili, že prístroj Microzym meria presnejšie a tiež je s ním jednoduchšia manipulácia.

[1] Karovičová, J., Kohajdová, Z., Šimko, P., Lukáčová, D.: Nahrung/Food, **3 (47)**, 2003, 188-190.
[2] Karovičová, J., Kohajdová, Z., Hybenová, E.: Chem. Pap., **4 (56)**, 2002, 267-274.
[3] Karovičová, J., Kohajdová, Z., Greif, G.: Czech J. Food Sci., **4 (20)**, 2002, 135-143.

5Po19

VPLYV PÔDNYCH SORBENTOV NA ZNÍŽENIE OBSAHU KADMIA A DUSIČNANOV V MRKVE

Alžbeta Hegedűsová[a], Ondrej Hegedűs[b], Klaudia Jomová[a], Ivan Belko[b]

[a]Katedra chémie, UKF Nitra, Tr. A. Hlinku 1, 949 74 Nitra, ahegedusova@ukf.sk, e-mail: kjomova@ukf.sk
[b]Výskumný ústav zeleniny s.r.o., Andovská 6, 940 01 Nové Zámky, hegeduso@zoznam.sk

Ozdravenie pôd je veľmi nákladné, ale do istej miery možno znížiť riziká aplikáciou sorbentov na báze prírodných zdrojov [1,2]. Cieľom práce bolo analyzovať vplyv vybraných pôdnych sorbentov na kumuláciu Cd a dusičnanov v konzumnej časti mrkvy.

Ako sorbent sa použil organické humusové hnojivo Humavit, prírodný zeolit a ich zmes. Sorbenty a kadmium sa aplikovali v definovaných dávkach. Modelové nádobové vegetačné pokusy boli založené vo výskumnom areáli VÚZ Nové Zámky. Korene mrkvy a pôdny substrát na konci vegetácie sa podrobili analýzam na obsah Cd a dusičnanov. Obsah Cd v pôdnom substráte sa stanovil vo výluhu HNO_3 a v mrkve po jej suchej mineralizácii metódou AAS elektrotermickou atomizáciou pár. Obsah dusičnanov v pôdnom substráte a v rastlinnom materiáli sa stanovil metódou HPLC.

Sledovaním potenciálnej schopnosti sorbentov znížiť kumuláciu kadmia možno konštatovať, že po aplikácii Humavitu sa jeho obsah v koreňoch mrkvy významne znížil úmerne obsahu sorbenta v pôde (o 13% až 24%). Pokusy so zeolitom ukazujú, že jeho úloha znížiť transfer Cd do koreňov mrkvy sa nesplnila. Súčasnou aplikáciou obidvoch použitých sorbentov sa nezaznamenali výrazné zmeny.

Sledovaním vplyvu sorbentov na kumuláciu dusičnanov v mrkve, je možné konštatovať, že jeho obsah bol hlboko podlimitný aj po pestovaní bez sorbentov, preto sa nepotvrdil ich vplyv na kumuláciu dusičnanov.

Táto práca bola podporovaná z úlohy ŠPVV - SP 27/028 OE 02/028 06 02 „Kvalita, bezpečnosť a funkčnosť primárnych potravinových zdrojov“.

[1] Vollmannová, A. - Ľahučký, L. - Tóth, J. - Hegedűsová, A. - Jomová, K.: Ekológia, 21, 442-448, (2002)
[2] Tóth, T.-Lazor, P.-Tomáš, J.- Vollmannová, A.- Halásová, M.-Ľahučký, L.- Hegedűsová, A. - Jomová, K.: Phytopedon, 1, 241-246, (2002)

5Po20

HOMEMADE ELECTROCHEMICAL SYSTEM FOR FABRICATION AND OPERATION OF MICROELECTRODES SUCH AS NITRIC OXIDE SENSOR

Jan Hrbáč, Čeněk Gregor, Tomáš Zelený

Department of Physical Chemistry, tr. Svobody 26, 77146 Olomouc, Czech Republic, e-mail: hrbac@aix.upol.cz

A device capable to carry out electrochemical experiments at a fraction of cost of commercial devices has been developed in our laboratory. The potentiostat was developed to design nitric oxide microelectrode sensors; namely electrochemical pretreatment, coating procedures as well as measurements using various protocols are possible with this device. A classical „three - op amp" circuit (also referred to as „adder type potentiostat") was adopted, having the advantage of small current measurements, high range dynamics, ease of computer interfacing, since both potential and current outputs are referenced to ground.

This circuit however has its drawbacks, it is susceptible to noise pick up and can suffer from instability in some circumstances. The frequency response of our potentiostat can be limited using a built-in low-pass Bessel filter, adjustable to 1, 10, 100 and 1000 Hz cut-off frequency. A 50-Hz notch filter can be introduced into signal route to cancel the interference from mains as well. Both filters are realised as non-cascade, their operational amplifiers being galvanically isolated, avoiding the introduction of offset voltages into the signal route.

The whole instrument is controlled by National Instruments PCI-6024E card. The card simultaneously provides potential program for the electrodes and collects current corresponding to studied electrode processes. System is designed as universal, covering the range of potentials ≤1.5 V, measured currents from 10 pA to 0.2 mA, scan rates up to 40 V/s are available. The software for potentiostat was programmed using Lab View 7.0. Examples of measurements using nitric oxide sensor fabricated with the aid of above described instrument will be outlined.

5Po21

USE OF TRANSGENIC ESCHERICHIA COLI CELLS TRANSFORMED BY CRT GENES FROM ERWINIA CAROTOVORA TO PRODUCTION OF LUTEIN, LYCOPENE AND BETA-CAROTENE

Hrdličková J., Vidláková T., Márová I., Drábková M.

Department of Food Chemistry and Biotechnology Faculty of Chemistry, Technical University of Brno, Purkyňova 118, 612 00 Brno, Czech Republic, email: hrdlickova@fch.vutbr.cz

Lutein, lycopene and beta-carotene belong to industrially important carotenoids, widely used in food and feed industry as natural pigments, provitamins and food/feed supplements. Carotenoids act as antioxidants and protect organism from photooxidative damage. Availability of carotenoids for industrial usage is limited by partial problems associated with their chemical synthesis as well as with isolation from natural sources. According to this fact, in last years some ways for overproduction of carotenoids including modern methods of molecular cloning and genetic engineering are studied.

Presented work is focused on isolation and cloning of crt gene cluster from bacteria *Erwinia carotovora*. Several methods of isolation and transfer of crt genes from bacteria *Erwinia carotovora* to recipient *E.coli* cells were tested and optimised. Identification of carotenoids produced by recombinant cells was verified by HPLC analysis.

In individual *E.coli* transformants production of lutein, lycopene and β-carotene was demonstrated. Production of carotenoids in E.coli cells transformed by several recombinant vectors pHSG298/crt was substantially higher then those found in *E.carotovora* cells.

Further, the posibility of regulated high-yield carotenoid production in laboratory fermentor was tested. Production of lutein in E. coli transformants was about 8x higher then amount of lutein found in *E. carotovora* cells, which were cultivated in the same conditions.

Acknowledgment: This work was supported by the project MSM 0021630501 of the Czech Ministry of Education, Youth and Sports.

5Po22

VYUŽITÍ CHROMATOGRAFICKÝCH NÁPLNÍ JAKO SORBENTŮ PRO EXTRAKCI ALKYLFENOLŮ MAGNETICKOU TUHOU FÁZÍ

Hubka T., Komárek K.,[1] Šafaříková M., Šafařík I.,[2] Pitter P., Sýkora V., Kujalová H.[3]

[1]Univerzita Pardubice, FCHT, Katedra analytické chemie, Nám. Čs. Legií 656, Pardubice, 53210 e-mail: tomas.hubka@tiscali.cz,
[2]Ústav ekologie krajiny, Akademie věd ČR, Na Sádkách 7, České Budějovice, 37005, e-mail: mirkasaf@seznam.cz,
[3]VŠCHT, Ústav technologie vody a prostředí, Technická 5, Praha 6, 16628, e-mail: hana.kujalova@vscht.cz

Tento příspěvek je zaměřen na porovnání výtěžností extrakce magnetickou tuhou fází zvolených alkylfenolů z vodných roztoků za použití náplní do chromatografických kolon a sorbentů používaných k rafinaci rostlinných olejů po jejich magnetické modifikaci.

Extrakce magnetickou tuhou fází (MSPE) je metoda na předúpravu vzorků vycházející z extrakce tuhou fází (SPE). Sorpce je založena na interakci mezi analyty a sorbenty s magnetickými vlastnostmi. Záchyt sorbentů z vodných roztoků probíhá pomocí vnějšího magnetického pole získaného z magnetického separátoru obsahujícího silný magnet. Tato metoda je oproti SPE rychlejší a s menšími nároky na použitou instrumentaci. V současné době se MSPE využívá hlavně v mikrobiologii, buněčné biologii, molekulární biologii, medicíně, biochemii, biotechnologiích a ekologii.

Sorbenty používané v MSPE jsou připravovány mísením

látek s magnetickými vlastnostmi s látkami se sorpčními vlastnosti pro dané analyty. Jako látky s magnetickými vlastnostmi se nejčastěji používají oxidy železa, oxid chromičitý, ferity a práškové železo. Pro izolaci alkylfenolů z vodných roztoků byly využity jako sorbenty zmagnetizované náplně do chromatografických kolon pro plynovou chromatografii. Tyto náplně jsou využívány pro separaci celé řady látek, proto by mohly být vhodnými magnetickými sorbenty. Testovány byly náplně typu Tenax a Chromosorb 101 - 105 a sorbenty používané při čištění rostlinných olejů - Tensil a Rudex.

Alkylfenoly jsou látky vznikající při biologickém rozpadu oxyethylenovaných alkylfenolů, které patří mezi neionické tenzidy. Tento rozklad je způsoben působením mikroorganizmů a probíhá např. ve vodních tocích či na čističkách odpadních vod. Látky vzniklé biologickým rozkladem jsou většinou více toxické a estrogenní než látky původní, proto je důležité sledovat jejich přítomnost ve vodách.

Výsledné výtěžnosti byly vypočteny z výsledků získaných za optimalizovaných podmínek. Bylo zjištěno, že výtěžnost extrakce závisí na struktuře alkylfenolu a hlavně na délce alkylového řetězce.

Poděkování: Tyto výsledky byly získány za podpory Grantové agentury České republiky, grant č. 203/03/1028.

5Po23

VPLYV ŤAŽKÝCH KOVOV NA SYNTÉZU PROTEÍNOV

Klaudia Jomová[a], Miroslav Zima[b], Martin Morovič[b], Alžbeta Hegedűsová[a]

[a] *Katedra chémie, UKF Nitra, Tr. A. Hlinku 1, 949 74 Nitra, e-mail: kjomova@ukf.sk*
[b] *Katedra botaniky a genetiky, UKF Nitra, Nábrežie mládeže 91, 949 74 Nitra*

Jednou z najčastejších foriem poškodenia bunky je denaturácia dôležitých biologických molekúl v plyvom vysoko reaktívnych oxidatívnych látok vznikajúcich v reakciách katalyzovaných ťažkými kovmi. Rastlinný organizmus reaguje na tieto zmeny modifikáciou látkového metabolizmu ako aj syntézou molekúl bunkového obranného systému. Súčasťou tohto obranného systému je aj skupina vysoko špecifických malých stresových proteínov (small heat shock proteins-shsp), ktoré sa priamo zúčastňujú na reparácii denaturovaných proteínov. Shsp boli pozorované v rastlinách rastúcich za prítomnosti kadmia [1], hliníka [2] a olova [3] ako skupina nízkomolekulových kyslých proteínov odlišných od proteínov viažúcich kovy.

Práca je zameraná na štúdium vplyvu ťažkých kovov na syntézu nízkomolekulových proteínov v koreňových vrcholoch vlčieho bôbu. V pokusoch boli aplikované roztoky troch ťažkých kovov (Pb, Cd, As) so štyrmi rôznymi koncentráciami. Korelácia medzi intenzitou syntézy shsp a koncentráciou jednotlivých roztokov kovov bola pozorovaná pomocou vertikálnej polyakrylamidovej elektroforézy proteínových extraktov v denaturačných podmienkach. Elektroforetické profily boli vyhodnotené denzitometricky. Taktiež bol sledovaný vplyv koncentrácie roztokov kovov na celkový obsah proteínov vo vrcholovej časti koreňov nakličovaných semien bôbu a na rastovú inhibíciu. Jednoznačne bolo potvrdené stupňovanie inhibície rastu koreňových vrcholov hlavne v prípade vyšších koncentrácií roztokov ťažkých kovov. Denzitogramy elektroforetických profilov poukazujú na zvýšenú syntézu proteínov s relatívnou molekulovou hmotnosťou okolo 17 kDa v porovnaní s kontrolným variantom.

Táto práca vznikla s podporou štátneho programu výskumu a vývoja „Ekologizácia a ekonomická racionalizácia primárnej rastlinnej produkcie“ ČÚ 01 VE 10 SE 01.

[1] Delhaize, E. - Robinson, N. J. - Jackson, P. J.: *Plant Mol. Biol.* 12, 487-497 (1989)
[2] Cruz-Ortega, R. - Ownby, J. D.: *Physiol. Plant.* 89, 211-219 (1993)
[3] Przymusiński, R. - Gwóźdź, E. A.: *Plant Physiol.* 154, 703-708 (1999)

5Po24

VSTUP ŤAŽKÝCH KOVOV DO KONZUMNEJ ČASTI *C. ARIETINUM* L. V ZÁVISLOSTI OD PÔDNYCH VLASTNOSTÍ

Klaudia Jomová[a], Miroslav Zima[b], Alžbeta Hegedűsová[a], Tomáš Tóth[c]

[a]*Katedra chémie, UKF Nitra, Tr. A. Hlinku 1, 949 74 Nitra, e-mail: kjomova@ukf.sk*
[b]*Katedra botaniky a genetiky, UKF Nitra, Nábrežie mládeže 91, 949 74 Nitra*
[c]*Katedra chémie FBP SPU, Tr. A. Hlinku 2, 949 74 Nitra*

Vysoká koncentrácia esenciálnych, toxických alebo potencionálne toxických ťažkých kovov v pôde má za následok ich transfer do rastlín [1], prostredníctvom ktorých sa dostávajú do potravového reťazca. Ich dostupnosť v systéme pôda - rastlina závisí od viacerých faktorov zahrňujúcich pH pôdy, obsah organickej hmoty ako aj rastlinný druh, stupeň vývoja a ďalšie [2,3]. Cieľom práce bolo sledovať vstup ťažkých kovov (Zn, Cu, Co, Ni, Cr, Pb, Cd) do konzumnej časti strukovinovej plodiny *C. arietinum* L. a zhodnotiť nezávadnosť dopestovanej plodiny. Na analýzy boli použité pôdy zo 4 odlišných lokalít s rôznym obsahom ťažkých kovov. Obsah sledovaných kovov v pôde bol stanovený vo výluhu 2 $mol.dm^{-3}$ HNO_3 metódou AAS. V semenách cícera bol obsah kovov stanovený metódou AAS po mineralizácii suchou cestou. Získané hodnoty boli porovnané s legislatívne danými limitnými hodnotami.

Obzvlášť vysoké koncentrácie Pb a Cd boli zistené v pôdach z lokalít Prenčov a Dudince, ktoré prevyšovali indikačné hodnoty C pre asanáciu. V semenách rastlín dopestovaných na všetkých použitých pôdach bol zistený zvýšený obsah Pb a Cd v porovnaní s najvyššie prípustným množstvom aj v prípadoch, keď pôdny obsah bol pod limitnými hodnotami. Z ostatných sledovaných kovov bol zistený len vyšší obsah Cu v semenách rastlín dopestovaných na pôde

z Prenčova. Získané výsledky dokazujú nevyhnutnosť sledovania zastúpenia jednotlivých ťažkých kovov v pôde aj v rastline, predovšetkým v konzumných častiach.

Táto práca vznikla s podporou grantu CGA UKF VI/15/2003.

[1] Hegedűsová, A., Hegedűs, O., Vollmannová, A.: Vedecké práce, VÚZ Nové Zámky 11, 32 - 36 (2002)
[2] Tomáš, J., Vollmannová, A., Tóth, T., Lazor, P., Musilová, Ž.: Chemické listy 97, 801 (2003)
[3] Keller, C., Hammer, D., Kayser, A., Richner, W., Brodbeck, M., Sennhauser, M.: Plant and Soil 249, 67 - 81 (2003)

5Po25

SELEKTIVNÍ SORPCE OXOANIONTU Se(IV) POMOCÍ SORBENTŮ S HYDRATOVANÝM OXIDEM ŽELEZITÝM

Kateřina Jurečková, Helena Parschová, Richard Burda, Zdeněk Matějka

Ústav energetiky, FTOP, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6
e-mail: jureckok@vscht.cz

V této práci jsou srovnávány granulovaný hydroxid železitý (GFH) a experimentální polymer/anorganický hybridní sorbent (HAIX) pro selektivní sorpci a desorpci oxoaniontu Se(IV). Granulovaný hydroxid železitý byl vyvinut pro levné a účinné odstranění nízkých koncentrací As z přírodních vod. Kromě As zachycuje tento sorbent i ostatní oxoanionty jako Mo, V, Sb. Tento komerčně dostupný sorbent je používán jako jednorázový a tato práce je zaměřena na možnost jeho regenerace.

U polymer/anorganického hybridního sorbentu se jedná o sférický makroporézní ionex, ve kterém byly chemicko-tepelnou úpravou rozptýleny nanočástice hydratovaného oxidu železitého.

Sorpce Se(IV) byly prováděny kolonovými dynamickými experimenty při specifickém zatížení s = 12V/Vo.h^{-1}. Sledování možnosti reprodukovatelnosti sorpce bylo prováděno pomocí třístupňové regenerace:

1. 2 % hydroxid sodný a 2 % chlorid sodný - 15 kolonových objemů při specifickém zatížení s = 4V/Vo.h^{-1}.
2. dest. voda - 10 kolonových objemů při specifickém zatížení s = 4V/Vo.h^{-1} a následné promytí dest. vodou při vyšším specifickém zatížení do pH<9,5.
3. sycená dest. voda oxidem uhličitým - 15 kolonových objemů při specifickém zatížení s = 4V/Vo.h^{-1}.

Tato práce vznikla za podpory Výzkumného záměru MŠMT České republiky MSM 604 613 7304.

[1] DeMarco M.J., SenGupta A.K., Greenleaf J.E., *Water Research, 37*,164-176, (2003)
[2] Cumbal L., Greenleaf J.E.,Leun D., SenGupta A.K., *Reactive & Functional Polymers, 54*,167-180, (2003)

5Po26

STUDIUM MECHANISMU VAZBY HUMINOVÝCH LÁTEK NA PŘÍRODNÍ MATERIÁL - KLINOPTILOLIT

Zuzana Kabelová, Miroslava Novotná

Ústav Energetiky, FTOP, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, e-mail: kabelovz@vscht.cz

Tato studie se zabývá sorpčními rovnováhami kationů těžkých kovů na povrchu zeolitů v přítomnosti huminových kyselin (HK). Cílem práce bylo objasnění mechanismu ke vzniku vazby mezi klinoptilolitem, měďí a HK. Bylo zkoumáno jak dochází ke vzniku vazby HK na zeolit. Zda se jedná o vznik komplexní vazby funkčních skupin HK na těžké kovy přítomné ve struktuře zeolitu (např. Fe) či zda jde pouze o fyzikální adsorpci na povrchu zeolitu.

Dále bylo zkoumáno jak vznik vazby klinoptilolit-Cu-HK ovlivňuje sorpci Cu a HK na zeolitu. Vznik této vazby byl sledován metodami molekulové spektroskopie. Při pokusech byl použit klinoptilolit od firmy ZEOCEM - Bystrá, v sodíkové formě. K takto upravenému klinoptilolitu byly postupně přidávány roztoky Cu a HK. Byl zkoumán vliv pořadí vstupních roztoků mědi (0,1mM) a HK (50mg/l). Statické testy byly prováděny při neupraveném pH (pH = 9) a po úpravě na pH = 5 (pomocí HCl).

Sorpční rovnovážné testy byly vyhodnocovány v korelaci se spektroskopickou studií (infračervenou, Ramanovou spektroskopií) a rentgenovou fluorescenční analýzou. Analýzy a spektra popisují vazbu těžkých kovů na HK a zeolit. S jejich znalostí pak můžeme odvodit mechanismy, které provázejí sorpční procesy v roztoku v závislosti na koncentraci kovu, iontové síle roztoků a pH. Byl pozorován výrazný rozdíl v množství zachycené HK na zeolitu v závislosti na koncentraci kovu v roztoku.

Práce byla vypracována s podporou MŠMT VZ 604 613 73 04

5Po27

STUDIUM ZÁCHYTU EUROPIA NA PEVNÉM EXTRAHENTU CMPO-PAN

Jan Kameník*, Ferdinand Šebesta

Centrum pro radiochemii a radiační chemii, Břehová 7, 115 19, Praha 1,
e-mail: jan.kamenik@fjfi.cvut.cz

Extrakční chomatografie je separační technika, která spojuje selektivitu extrakčních činidel pro kapalinovou extrakci s postupným a opakovaným ustanovováním rovnováhy v chromatografickém uspořádání. Na katedře jaderné chemie ČVUT byl vyvinut postup přípravy pevných extrahentů, které obsahují v pojivové matrici polyakrylonitrilu (PAN) extrakční činidlo v pevné nebo kapalné formě. Takové materiály lze použít například v extrakční chromatografii. Oktyl(fenyl)-N,N-diizobutylkarbamoyl-

methylfosfinoxid (CMPO) je extrakční činidlo, které efektivně extrahuje trojmocné aktinidy z kyselých roztoků kyseliny dusičné a chlorovodíkové [1].

V prostředí kyseliny dusičné byl studován záchyt europia na dvou materiálech CMPO-PAN, připravených rozdílnou technikou. Výsledky byly vzájemně porovnány. Byla stanovena závislost hmotnostních rozdělovacích koeficientů (Dg) europia v závislosti na koncentraci kyseliny dusičné v roztoku. Studium kinetiky a kapacity pro záchyt europia obou materiálů bylo provedeno v prostředí 0,001 M HNO_3 za přítomnosti dusičnanu sodného (0,1 mol/l).

Bylo zjištěno, že europium je na studovaných materiálech efektivně zachytáváno v koncentrovaných roztocích kyseliny dusičné (0,1-5 mol/l). V rozporu s očekáváním se zachytávalo europium i ve zředěných roztocích (0,001-0,1 M HNO_3). Mírně vyšší Dg(Eu) (0,001-0,1M HNO_3) a praktická kapacita byla nalezena pro materiál se zakotveným kapalným solvátem CMPO. Rychlejší kinetika záchytu byla naopak nalezena na materiálu připraveným zakotvením pevného činidla.

[1] Horwitz E.P., Kalina D.G.: Solv. Extr. Ion Exch. 2 (2), 179-200, 1984.

5Po28

EXTRAKCE UHLOVODÍKŮ NIŽŠÍCH ROPNÝCH FRAKCÍ Z VODNÝCH ROZTOKŮ MAGNETICKOU TUHOU FÁZÍ

Komárek K.[1], Šafaříková M.[2], Kandelová M.[1], Šafařík I.[2]

[1]Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Katedra analytické chemie, Nám. Čs. Legií 565, 53210 Pardubice, e-mail: karel.komarek@upce.cz
[2]Ústav ekologie krajiny AV ČR, Na Sádkách 7, 37005 České Budějovice, mirkasaf@uek.cz

Vzhledem k tom, že množství kontaminujících uhlovodíků je ve většině vzorků vod malé, není možná přímá analýza těchto vzorků. Proto je před stanovením této skupiny kontaminantů, ale i jiných, prováděna předúprava vzorků k analýze.

Mezi základní způsoby předúpravy vzorků vod před stanovením méně těkavých ropných uhlovodíků patří extrakce v sytému kapalina - kapalina, extrakce tuhou fází (SPE) a mikroextrakce tuhou fází (SPME). Získané kapalné extrakty jsou pak analyzovány spektrálními a separačními metodami a nebo jejich kombinacemi. Sorbované uhlovodíky mohou být i přímo desorbovány v dávkovacím systému plynového a nebo kapalinového chromatografu (např. kombinace SPME - GC a SPME - HPLC).

Metody předúpravy vzorků jsou stále vyvíjeny tak, aby splňovaly řadu požadovaných kritérií. I my jsme se v naší studii zabývali touto oblastí výzkumu, kdy se snažíme využít techniku extrakce magnetickou tuhou fází (Magnetic solid phase extraction - MSPE), která je používána hlavně v medicíně, biochemii a mikrobiologii a.j. i pro předúpravu vzorků vod obsahujících ropné uhlovodíky.

Tento postup se skládá z několika základních kroků:

1) Sorpce uhlovodíků z vody na magnetický sorbent za rotačně-vibračního způsobu míchání.
2) Odseparování sorbentu s naadsorbovanými uhlovodíky od vodné fáze pomocí vnějšího magnetického pole.
3) Eluce naadsorbovaných uhlovodíků z magnetického sorbentu zvoleným rozpouštědlem za rotačně-vibračního způsobu míchání.
4) Odseparování magnetického sorbentu od extraktu pomocí vnějšího magnetického pole.

U každého kroku byly hledány nejvhodnější pracovní podmínky. Získané extrakty byly analyzovány pomocí kapilární plynové chromatografie. Vzhledem k rychlosti a jednoduchosti se jeví tato předúprava vzorků jako perspektivní.

Poznámka: Práce je částí řešeného projektu č. 203/03/1070 podporovaného GAČR.

5Po29

CHIP-BASED BIOAFFINITY REACTOR WITH IMMOBILIZED ANHYDROTRYPSIN FOR ISOLATION OF SPECIFIC TRYPTIC PEPTIDES OF HUMAN NEUROTENSIN

Korecká L.*, Křenková J.*/**, Minc N.***, J.-L. Viovy*** Bílková Z.*

** Department of Analytical Chemistry and Deprtment of Biological and Biochemical Sciences, University of Pardubice, Strossova 239, 530 03 Pardubice, Czech Republic; e-mail: lucie.korecka@upce.cz*
***Institute of Analytical Chemistry, Academy of Sciences, Veveří 97, Brno, Czech Republic*
**** Laboratory of Physical chemistry, Institute Curie (UMR CNRS/IC 168), Paris Cedex 05, France*

One of the modern trends in biochemistry is focused on the utilization of microfluidic device (Ķ-CHIP) for protein analysis due to many advantages (low sample consumption, highthroughput analysis etc.). Functional spherical nanoparticles with controlled tendency to aggregate and controlled level of nonspecific sorption could be focused in channel of magnetically active microfluidic device for isolation or enzyme modification of target protein directly in a channel of microfluidic device [1].

Biospecific carrier prepared by immobilization of anhydrotrypsin on magnetic nanoparticles was used for isolation of specific peptides from complex mixture of tryptic peptides in one step. Ķ-chip IMER (immobilized magnetic enzyme reactor) with trypsin in tandem with chip-based IMAR (immobilized magnetic affinity reactor) with anhydrotrypsin was used for simplification of peptide mapping including the digestion of protein coupling with isolation of peptides for following analysis by HPLC and MS.

Anhydrotrypsin is catalytically inactive derivative of bovine trypsin where serine residue (Ser-195) is first modified with phenylmethanesulfonyl fluoride (PMSF), an active site-directed reagent, the modified protein is then treated with alkali results in β-elimination of the modified group and the serine is converted to a dehydroalanine[1]. Anhydrotrypsin enables highly specific trapping of peptides

corresponding to the products generated by the action of various trypsin-like proteases and binds, in slightly acidic conditions, only specific peptides containing arginine and lysine residues at their C-termini [2].

High purity and preconcentration of peptides isolated on immobilized anhydrotrypsin, confirmed by MS, significantly facilitated the identification of protein fingerprint even for protein in submicromolar concentration.

Acknowledgements: This work was supported by grants MSM0021627502 and Grant Agency of the Czech Republic GACR 203/05/0241.

[1] Jako, H., Foster, R.J., Ryan, C.A.: Biochem. Biophys. Res. Commun. 47 (1972) p. 1402-1407.
[2] Ishii S., Yokosawa H., Shiba S., Kasai K.: Biochemistry, pathophysiology and Clinical Aspects vol. 120A (1979) p. 15-27.

5Po30

VPLYV ZNÍŽENIA PRÍDAVKU VÁPNA NA KVALITU TECHNOLOGICKÝCH ŠTIAV POČAS VÝROBY CUKRU

Marta Kostičová, Katarína Ochránková, Lucia Güllová, Alexander Dandár

Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU, Katedra potravinárskej technológie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, e-mail: marta.kosticova@stuba.sk

V procese čistenia / epurácie / surovej šťavy, ktorá sa získa extrakciou sacharózy z cukrovej repy sa využíva účinok oxidu vápenatého s následnou tvorbou uhličitanu vápenatého v procese saturácie oxidom uhličitým. Oxid vápenatý a oxid uhličitý si cukrovar vyrába z vápenca. Presné riadenie prídavku vápna je v súčasnosti v cukrovarníckom priemysle obzvlášť aktuálne, pretože znižovanie výrobných nákladov je jedným z rozhodujúcich predpokladov pre udržanie konkurencieschopnosti cukrovaru na trhu s cukrom.

Cieľom práce bolo stanovenie optimálneho spôsobu epurácie surovej šťavy s ohľadom na kvalitu a fyzikálno - chemické vlastnosti štiav počas epuračného procesu, porovnanie kvality kalných a čírych štiav s hľadiska čistoty, tvrdosti, farby, obsahu redukujúcich a dusíkatých látok, filtračných a sedimentačných charakteristík. Tieto charakteristiky sme sledovali pri rôznych prídavkoch vápna v postupe hlavného čerenia / dočerenia / surovej resp. predčerenej šťavy.

Podľa starších zdrojov [1,2] je optimálne viesť hlavné čerenie na alkalitu 1,8 - 2,0 g CaO/dl. V súčasnosti sa však táto dávka znižuje. V našej práci sme sledovali vplyv prídavku vápna na alkalitu 2,0; 1,8; 1,5; 1,3; 1,0; 0,8 g CaO/dl. Zamerali sme sa hlavne na rozsah alkality 0,8 - 1,5 g CaO/dl.

Optimálne technologické ukazovatele sme zistili pri minimálnom prídavku vápna na alkalitu dočerenia 1,3 g CaO/dl. Súčasne sme zistili optimálny postup epurácie: Studené predčerenie / teplota 35°C / na alkalitu 0,20 - 0,25 g CaO/dl s recirkuláciou kalu z 1. saturácie v množstve 100 g kalu / priemerná sušina kalu 35,22 % /, teplé dočerenie /teplota 85°C / na alkalitu minimálne 1,3 g CaO/dl, 1. saturácia / teplota 85°C / na alkalitu 0,08 - 0,10 g CaO/dl, separácia kalu, II. saturácia / teplota 95 °C / na optimálnu alkalitu 0,015 - 0,020 g CaO/dl so súčasným pridávaním vápenného mlieka v množstve 0,20 g/ dl šťavy, separácia kalu a vyvárka čírej II. saturovanej / ľahkej šťavy /. Priemerné technologické hodnoty výslednej ľahkej šťavy: Kvocient čistoty = 86,34 %, tvrdosť = 249,36 mg CaO/ 100 g sušiny, farba - c_{560} = 567,12 cm²/ kg, redukujúce látky = 0,232 % / 100 P, dusíkaté látky = 336,32 mg/100 g sušiny. Kvalita kalnej 1. saturovanej šťavy: Filtračný koeficient F_k = 4,8 s, objem kalu po 25 minútach sedimentácie V_{25} = 41,6%. Zníženie alkality na hodnoty 0,8 - 1,0 g CaO/dl sa prejavilo zhoršenými technologickými ukazovateľmi / zvýšená tvrdosť a farba ľahkej šťavy /.

[1] Vašátko, J.: Čistenie repnej šťavy redukovanou prísadou vápna na čerenie.1.vydanie Bratislava: Spolok chemikov Slovákov, 1950, 400 s.
[2] Bretschneider, R.: Technologie cukru. 2. vyd. Praha: SNTL, ALFA, 1980, 424 s.

5Po31

BIOLOGICKY AKTIVNÍ POLYAMINY V HOVĚZÍM A VEPŘOVÉM MASE A V JÁTRECH

Petra Krausová

Jihočeská univerzita, Zemědělská fakulta, katedra chemie, 370 05 České Budějovice, Česká republika, e-mail: krausova.petra@email.cz

Polyaminy (PA) putrescin (PUT), spermidin (SPD) a spermin (SPM), které se běžně vyskytují v buňkách živých organismů, plní řadu významných fyziologických funkcí. Podílejí se i na růstu a množení lidských buněk. Proto jsou významné např. při růstu nádorů, či při hojení ran. Na těchto pochodech se podílejí PA jak endogenní, tak přijímané potravou. Lékaři proto potřebují znát jejich obsah v potravinách. Údaje v literatuře jsou však dosud jen omezené [1].

Stanovili jsme proto obsahy PA v mase a játrech skotu a prasat 24 hodiny po porážce jako výchozí hodnoty před skladováním a zpracováním. Ze vzorků roštěnce/pečeně, kýty a jater byly PA extrahovány 0,6 M kyselinou chloristou, derivatizovány benzoylchloridem a jako *N*-benzamidy stanoveny micelární elektrokinetickou kapilární chromatografií [2].

Obsah PUT byl vesměs pod mezí detekce 2.1 $mg.kg^{-1}$, protože tento amin vzniká z ornithinu či argininu až za podmínek příznivých pro rozvoj dekarboxylačních bakterií. V mase byl rovněž nízký obsah SPD. V mase mladých býků (n = 60) byl obsah SPM 22 ≤ 6 $mg.kg^{-1}$, v mase krav (n = 8) byl statisticky průkazně nižší. V pečeni a kýtě vepříků (n = 15) byl obsah SPM 27 ≤ 8 $mg.kg^{-1}$, což je statisticky významně více než v mase prasniček (n = 15).

Podstatně odlišná byla situace u jater, pro něž dosud v literatuře chybějí údaje. Průměrné obsahy v játrech býčků (n =

58) byly 24, 122 a 43 mg.kg^{-1} pro PUT, SPD a SPM. Obdobné hodnoty SPD a SPM pro obě pohlaví prasat (n = 36) byly 32 a 115 mg.kg^{-1}. Tato zjištění potvrzují, že obsahy SPD a SPM jsou vyšší v mladých a metabolicky aktivních tkáních. Hovězí i vepřová játra se řadí mezi nejbohatší zdroje SPD a SPM mezi potravinami.

Tato práce vznikla za finanční podpory MŠMT ČR v rámci záměru MSM 6007665806/2/6.

[1] Kalač P., Krausová P.: *Food Chem., 90*, 219-230 (2005).
[2] Křížek M., Pelikánová T.: *J. Chromatogr. A*, 815, 243-250 (1998).

5Po32

4-FENYLAZO-3,5-DIAMINOPYRAZOLOVÉ INHIBITORY CYKLIN-DEPENDENTNÍ KINASY 9

Vladimír Kryštof[a], Petr Džubák[b], Marián Hajdúch[b], Petr Cankař[c], Jan Slouka[c], Martina Paprskářová[a], Jakub Rolčík[a], Peter M. Fischer[d], Miroslav Strnad[a]

[a] *Laboratoř růstových regulátorů, Přírodovědecká fakulta University Palackého & Ústav experimentální botaniky AV ČR, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc, krystof@aix.upol.cz;*
[b] *Laboratoř experimentální medicíny, Lékařská fakulta Univerzity Palackého a Fakultní nemocnice, Puškinova 6, 775 20 Olomouc;*
[c] *Katedra organické chemie, Přírodovědecká fakulta University Palackého, tř. Svobody 8, 771 46 Olomouc;*
[d] *Cyclacel Limited, James Lindsay Place, Dundee DD1 5JJ, Scotland*

Cyklin-dependentní kinasy (CDK) regulují řadu komplexních vnitrobuněčných procesů, jakými jsou např. buněčný cyklus, diferenciace, transkripce či apoptóza. Specifické inhibitory CDK se tak staly novou potenciální generací chemoterapeutik cílených zvláště proti nádorovým onemocněním [1]. Některé z nich již dokonce prochází druhou fází klinického testování účinnosti na vybrané typy nádorových onemocnění [2, 3]. Dnes se však již uvažuje také o dalších možných farmakologických aplikacích, neboť některé inhibitory CDK např. brání replikaci virů (HIV, herpesviry, cytomegaloviry, papillomaviry) a množení buněčných parazitů (*Plasmodium, Leishmania, Trypanosoma*) [2].

Rutinním hledáním nových inhibitorů proteinkinas s možným farmakologickým uplatněním jsme identifikovali 4-fenylazo-3,5-diamino-pyrazoly jako nové kompetitivní inhibitory CDK2/cyklin E. Měření jejich inhibičních schopností na panelu lidských proteinkinas potvrdilo specifitu k CDK s překvapivě vysokou afinitou k CDK9/cyklin T, součásti transkripčního elongačního faktoru P-TEFb. Nejsilnější inhibitor z připravené série byl schopen blokovat buněčný cyklus buněčné nádorové linie MCF7 na rozhraní G1/S, a to pravděpodobně jako přímý důsledek inhibice CDK2 a CDK4 v buňkách. Snížená fosforylace proteinu RB a C-terminální domény RNA polymerasy II (přirozených substrátů CDK), inhibice syntézy mRNA a indukce nádorového supresoru p53 pak potvrdily předpokládaný mechanismus působení nových inhibitorů CDK v buňce. Všechny tyto mechanismy výrazně přispívají k zastavení proliferace buněk a aktivaci drah vedoucích k apoptóze.

Tato práce vznikla díky podpoře Grantové agentury ČR (204/03/D231).

[1] Sielecki T.M., Boylan J.F., Benfield P.A., Trainor G.L.: *J. Med. Chem., 43,* 1-18 (2000).
[2] Meijer L., Raymond E.: *Acc. Chem. Res., 36*, 417-425 (2003).
[3] Benson C., Kaye S., Workman P., Garrett M., Walton M., de Bono J.: *Br. J. Cancer, 92*, 7-12 (2005).

5Po33

NAŠE ZKUŠENOSTI S CHEMOTAXONOMICKOU IDENTIFIKACÍ FYTOPATOGENNÍCH BAKTERIÍ

Anna Kryštofová, Jaroslav Horký

Státní rostlinolékařská správa, Odbor diagnostiky, Šlechtitelů 23, 779 00 Olomouc, Česká republika, e-mail: anna.krystofova@srs.cz

Mikrobiologické laboratoře vyžadují rychlé a spolehlivé metody pro identifikaci neznámých bakterií. Jedním z úkolů odboru diagnostiky Státní rostlinolékařské správy je identifikace fytopatogenních bakterií, které způsobují ekonomické ztráty poškozováním hospodářsky významných druhů rostlin. V současné době je dostupná celá řada systémů pro fenotypickou nebo genotypickou identifikaci mikroorganismů.

Jedním z nejefektivnějších chemotaxonomických způsobů je identifikace na základě kvalitativní a kvantitativní analýzy mastných kyselin - Microbial Identification System (MIS) vyvinutý firmou MIDI Inc, Newark, USA. Z rostlinného vzorku jsou vyizolovány a namnoženy bakterie; jejich mastné kyseliny jsou po extrakci převedeny na methylestery, které jsou analyzovány plynovou chromatografií. Profil mastných kyselin je pak srovnáván s knihovnou známých mikroorganismů. V naší laboratoři využíváme MIS jako jednu ze standardních diagnostických technik pro identifikaci např. *Clavibacter michiganensis subsp. sepedonicus* (kroužkovitost brambor), *Ralstonia solanacearum* (hnědá hniloba bramor), *Erwinia amylovora* (spála růžovitých), *Clavibacter michiganensis* subsp. *insidiosus* (vadnutí vojtěšky), *Agrobacterium tumefaciens* (bakteriální nádorovitost). MIS často kombinujeme s některými molekulárně-biologickými, biochemickými a nebo imunochemickými metodami.

Po34

USING *S. CEREVISIAE* D7 AND *E. GRACILIS* FOR TESTING ANTIMUTAGENICITY OF WHITE AND RED WINES

Kubešová J., Mikulcová A., Tihlářová E., Chvátalová R., Ptáček P., Macuchová S., Márová I.

Department of Food Chemistry and Biotechnology, Faculty of Chemistry, Brno University of Technology, Purkyňova 118, 612 00 Brno, Czech Republic, email: kubesova@fch.vutbr.cz

Polyphenolic compounds are believed to be responsible for the healthy effects of moderate wine consumption. These dietary components have antioxidant properties because they can quench free radicals, and therefore, minimize oxidative stress damage.

In this work yeast *Saccharomyces cerevisiae* D7 and a protozoon *Euglena gracilis* were used to study antimutagenicity (ability to suppress mutagenic activity) of white (Veltlínské zelené, Rulandské šedé) and red wines (Modrý Portugal, Svatovavřinecké). The frequency of spontaneous convertants at the tryptophan locus trp5-12/trp5-27 and revertants at the isoleucine locus ilv1-92/ilv1-92 was tested in *S. cerevisiae* test with 4-nitroquinoline-1-oxide as a standard mutagen. In test with E. gracilis, the experiments were carried out with ofloxacin as a standard mutagen, which caused reduction of chlorophyll absorption by 663 and 645 nm. The content of rutin, quercetin, morin, resveratrol, catechin, catechin gallate and fisetin was analyzed by HPLC method. The total antioxidant status of wines was determined using ABTS method.

The wines exhibited positive antimutagenic activity. The content of flavonoids and the antioxidant capacity was higher using red wines. Higher antimutagenic activity was observed in red wines than in white wines. Beneficial effects of red wine can be attributed to high content of phenolic compounds.

Acknowledgements: This work was supported by project MSM 0021630501 of Czech Ministry of Education.

5Po35

SORPTION OF STRONTIUM ON SELECTED GROUP OF BENTONITES

Kufčáková J., Galamboš M., Rajec P.

Comenius University, Department of Nuclear Chemistry, Mlynská dolina CH-1, 842 15 Bratislava, e-mail: kufcakova@fns.uniba.sk

Sorption on bentonite will play an important role in retarding the migration of radionuclides from a waste repository[1,2]. Bentonite is characterized by low permeability, water swelling capability and excellent sorption potential for cationic radionuclides. Thus, bentonite was frequently adopted as a potential buffer or backfill material in the construction of repositories for the disposal of the radioactive waste. To correctly assess the sorption potential of radionuclides on bentonite is essential for the development of predictive migration models.

The sorption of strontium on bentonite from different Slovak deposits - Jelšový potok, Kopernica and Lieskovec has been INVESTIGATED under various experimental conditions, such as contact time, pH, sorbate concentrations, presence of complementary cation. Sorption was studied using the batch technique.

The uptake of Sr was rapid and equilibrium was reached almost instantaneously. The instantaneous uptake of strontium may be due to adsorption and/or exchange of the metal with some ions on the surface of the adsorbent. The percentage sorption for Sr decreased with increasing metal concentration. The sorption increased by increasing pH.

The sorption isotherm is a convenient way to express the sorption behaviour of a radionuclide on bentonite. Two characteristics in a sorption isotherm, the sorption capacity and affinity, can be used to represent the sorption potential. Langmuir isotherm model was used to fit the data of sorption experiments.

Radiation stability has been investigated, the higher sorption parameters were observed for the irradiated bentonites, which can be explained by the increase of specific surface and change of solubility of the irradiated samples of bentonite.

The best sorption characteristics distinguish bentonite Kopernica, sorption capacity of the fraction under 45 μm is 0,48 $mmol.g^{-1}$. The highest values of distribution coefficient were reached for the bentonite Jelšový potok. The lowest sorption capacity was attained for the bentonite Lieskovec.

Bentonites were chemically treated and sodium forms were prepared and tested for the sorption characteristics. In all cases the colloids were observed in the supernatant after the shaking and values of pH after the sorption are shifted to alkaline area. The modification of the bentonite is not recommended, because alkaline pH combined with presence of potassium and temperature above 100°C can cause illitization of the smectite and loosing of sorption characteristics.

The presence of complementary cations, Na^+, K^+, NH^{4+}, Ca^{2+}, Mg^{2+} and Ba^{2+} depresses the sorption of Sr on bentonite. In the case of bentonite Kopernica the effectiveness in reducing the sorption of strontium by cations followed the order $K^+ < NH^{4+} < Na^+ < Mg^{2+} < Ca^{2+} < Ba^{2+}$. Results indicate that the sorption of Sr^{2+} on bentonite will be affected by the presence of high concentrations of various salts in the waste water effluents.

[1] Tsai S.-Ch., Juang K.-W.: *J. Radioanal. Nucl. Chem,. 243* (3), 741-746 (2000)

[2] Khan S. A., Rehman R.-U., Khan M. A.: *Waste Managem., 15*, 641-650 (1995)

5Po36

DETECTION OF SUGAR SYRUPS ADDITION TO HONEY

Kristína Kukurová[1], Veronika Soukupová[2], Jolana Karovičová[1], Michal Voldřich[2]

[1]*Department of Food Science and Technology, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovak Republic,*
e-mail: kristina.kukurova@stuba.sk
[2]*Department of Food Preservation and Meat Technology, Faculty of Food and Biochemical Technology, Institute of Chemical Technology, Technická 3, 166 28 Prague 6, Czech Republic*

The adulteration of honey with low-cost sweeteners in order to maximise profits is a common practice. Starch hydrolysates can be added to honey in significant amounts without producing major changes in the sugar profile.

The objective of this work was to evaluate the authenticity of eight honey samples purchased from the Slovak market. Internal standard isotope ratio analysis (ISCIRA) has been used to measure of $^{13}C/^{12}C$ ratios in the protein and the sugars of honey and HPLC-RI to determination of sugar profile of honey samples. Screening test based on reagent of starch dextrins with ethanol in acid medium to form a turbidity was compared with the isotope ratio analysis to determine adulteration of honey by addition of sugar syrups.

In one sample of forest honey was detected addition of sugar syrup by both isotopic analysis and screening test. Content of C4 sugars was 19.25 %. Three of analysed samples had exceeded amount of sucrose. Authentic sample of honey, which was verified by analysis of carbon isotopic ratio, was consecutively adulterated by 10, 20, 50, 75 and 100 % addition of fructose corn syrup to confirm a linear dependence between content of sugar syrup and $\delta 13C$ value of honey.

The Slovak Grant Agency for Science VEGA (Grant No. 1/0102/2003), National program of Research and Development (Grant No. 749/s/2003) and APVT (Grant No. 20-002904) supported this work.

[1] Padovan, G. J., Jong, D., Rodrigues, L. P., Marchini, J. S.: Food Chem., 82, 633-636, (2003).
[2] AOAC Official Method 991.41 C-4 Plant Sugars in Honey. Internal Standard Stable Carbon Isotope Ratio Method (1991).

5Po37

THE EVALUATION OF SOFT DRINKS

Jarmila Lehkoživová, Jolana Karovičová, Milan Suhaj*, Kristína Kukurová, Zlatica Kohajdová, Ján Čimbora[a]

[a]*Department of Food Science and Technology, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovak Republic,*
e-mail: jarmila.lehkozivova@stuba.sk,
**Food Research Institute, Priemyselná 4, 824 75 Bratislava, Slovak Republic*

The aim of this study was determination of the alternative sweeteners content in soft drinks to verification of observance of maximum allowed limits and monitoring of sweet taste decay.

The content of acesulfam K, saccharine and cyclamates was detected by CITP with conductivity detection. 6 samples of soft drinks from a local supermarket were analysed. 0.5 mM HCl + 0.1 % MHEC was used as a leading electrolyte and 10 mM citric acid as a terminating electrolyte [1, 2]. The content of acesulfam K in samples ranged from 1.65 $mg.dm^{-3}$ to 189.19 $mg.dm^{-3}$, the content of saccharine ranged from 4.86 $mg.dm^{-3}$ to 73.13 $mg.dm^{-3}$ and the content of cyclamates ranged from 113.96 $mg.dm^{-3}$ to 364.77 $mg.dm^{-3}$. All samples were up to standard of Decree of Slovak Republic for the content of acesulfam K and saccharine but 3 samples exceeded the maximum allowed limit for cyclamates [3].

Ten samples with and without alternative sweeteners were evaluated of sweet taste decay. For the samples of soft drinks, TI parameters from time-intensity curves were obtained: maximum intensity, the time to maximum intensity and duration. The samples with alternative sweeteners had longer sweet taste decay than samples without alternative sweeteners.

The Slovak Grant Agency for Science VEGA (Grant No. 1/0102/2003), National program of Research and Development (Grant No. 749/s/2003) and APVT (Grant No. 20-002904) supported this work.

[1] VILLA LABECO s.r.o.: Analýza umelých sladidiel v potravinách. Aplikačný list č. 23.
[2] VUP: Interná metodika, Bratislava.
[3] Decree of Slovak Republic No. 608/5/2004-100 relating to food additives (2004).

5Po38

FINE DUST PARTICLES FROM METALLURGICAL WORKS: SURFACE PROPERTIES, HEAVY METALS MOBILITY AND BIOTOXICITY

Jana Leskova, Jana Seidlerova

Institute of Materials Chemistry, VSB - Technical University Ostrava, 17. listopadu 15 ,
Ostrava - Poruba, 708 33, Czech Republic,
e-mails: jana.leskova.st1@vsb.cz, jana.seidlerova@vsb.cz

Release of dust particles from steelworks and blast furnace plants into environment represents serious health risk for humans and ecosystem eventually. The particles are dangerous by virtue of its small size and heavy metals content, especially zinc, cadmium, lead, and copper).

However, traditional chemical analysis cannot ensure that all toxic chemicals in studied samples will be identified, nor can be used to estimate interactions among compounds in a mixture of toxicants. The leachability and aquatic toxicity of potentially toxic metals were assessed by chemical analysis of water extracts and battery of toxicity bioassays on water organisms from different trophic levels. To assess acute toxicity of metals from dust particles, bioluminescence assay (*Vibrio fischeri*), immobilization assay (*Daphnia magna*), and growth inhibition assay (*Scenedesmus subspicatus*) was carried out. According to experimental results, acute toxicity of steelworks dusts is related with heavy metal content. Results from *D. magna* assay shows different EC50 values for water extract from electric arc furnace dusts compared to other tests. Potential toxicity of studied samples is given by bioavailable forms of heavy metals.

Because of inhalation exposure route of fine dust particles it is necessary to include pulmonary toxicity evaluation in further research as well and to predict mobility of metals in biofluids after inhalation and ingestion of dusts.

This study was supported by the project: FRVS 2904/2005.

5Po39

ZMĚNY MASTNÝCH KYSELIN V TEPELNĚ OŠETŘENÝCH TAVENÝCH SÝRECH

Blanka Loupancová, Eva Vítová, Lenka Hrozová, Hana Štoudková, Miroslav Fišera

Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Purkyňova 118, 612 00 Brno, Česká Republika;
e-mail: loupancová@fch.vutbr.cz

Lipidy jsou jednou ze základních složek potravin. Jsou zásobárnou energie a také jejím rychlým zdrojem. Mastné kyseliny, zejména nenasycené, jsou tedy jako součásti tuků významnými nutričními ukazateli [1,2].

Cílem této práce bylo vyzkoušet novou metodu přípravy methylesterů mastných kyselin, porovnat ji s normovanou metodou a validovat ji. Byla vybrána metoda esterifikace methanolem za katalýzy hydroxidem draselným. Připravené vzorky methylesterů byly analyzovány pomocí plynové chromatografie s plamenově ionizační detekcí [3].

Tímto způsobem byly porovnány vzorky tavených sýrů ošetřené pasteračním a sterilačním záhřevem. Tavené sýry byly vyrobeny tavením směsi surovin, již dále tepelně neošetřeny. Sýry ošetřené sterilačním záhřevem byly následně ještě podrobeny sterilaci při teplotě 117 °C s výdrží 20 minut. Sterilací ošetřené sýry jsou součástí vojenské bojové dávky potravin, především jako zdroj vápníku, ale také bílkovin a tuků.

Bylo zjištěno, že vlivem sterilačního záhřevu dochází ke snížení obsahů téměř všech mastných kyselin. Tento pokles lze vysvětlit vznikem komplexů lipidů s proteiny, do jisté míry také degradací mastných kyselin a jejich autooxidací vlivem sterilační teploty. Příčina úbytku mastných kyselin je nyní předmětem dalšího zkoumání. Z technologického hlediska je důležité, že tyto jevy jsou kompenzovány zvýšenou dobou minimální trvanlivosti tavených sýrů, která činí 2 roky.

[1] Velíšek J.: *Chemie potravin*. OSSIS, Tábor 1999.
[2] Roginski H.: *Encyclopedia of Dairy science*. Academic press, London 2003.
[3] ČSN EN ISO 5509: Animal and vegetable fats and oils - preparing of methyl esters of fatty acids (2000)

5Po40

INFLUENCE OF FOOD SUPPLEMENTS CONTAINING ANTIOXIDANTS AND/OR PUFA ON SELECTED METABOLIC FUNCTIONS IN HUMANS

Macuchova S.[1], Kotrla R.[2], Marova I.[1], Mikulikova R.[3]

[1]Department of Food Chemistry and Biotechnology, Faculty of Chemistry, Brno University of Technology, Purkyňova 118, 612 00, Czech Republic, e-mail: macuchova@fch.vutbr.cz
[2]Department of Clinical Biochemistry, Regional Hospital, Kyjov, Czech Republic
[3]Research Institute of Brewing and Malting, Plc., Malting Institute in Brno, Czech Republic

Cardiovascular diseases constitute the major cause of morbidity and mortality in developed societies. Many types of these conditions are secondary to atherosclerosis, which is connected with hyperlipidaemia - increased levels of cholesterol, especially LDL, and triglycerides. Reactive oxygen species attack LDL. Oxidised LDL leads to the formation of atheromatic plaques. Moreover, oxidised LDL triggers inflammatory reactions, while elevated blood lipids can result in high plasma lipid peroxides that promote endothelial damage in atherosclerosis. Reduction of blood lipids and inhibition of LDL oxidation are prime therapeutic approaches to the treatment of atherosclerosis. Antioxidant agents, alone or in combination with hypolipidemic drugs are considered useful for this treatment. Food supplements containing such substances can serve as additional therapeutical agents.

The aim of this work was to contribute to actual knowl-

edge of the influence of an antioxidant supplement type on metabolic and antioxidant status in a sample of hyperlipidemics. The influence of vitamin supplementation on several clinical and biochemical parameters as well as on levels of antioxidants in humans was carried out in an intervention clinical study. The total of 30 subjects were enrolled into the study. Food supplement containing PUFA/antioxidants was applied to subjects. During the experiment blood samples were taken in regular intervals. A set of selected biochemical parameters, total antioxidant status, levels of low molecular weight antioxidants (carotenoids, retinol, α-tocopherol) as well as selected fatty acids and advanced oxidation protein products were determined in all subjects.

5Po41

EXOPOLYSACCHARIDES PRODUCED BY LACTIC ACID BACTERIA

Mária Matulová[1], Peter Capek[1], Soňa Jamrichová[2], Maroš Drončovský[2], Luboš Želiba[2]

[1]Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, chemmatu@savba.sk,
[2]Dairy Research Institute, Dlhá 95, 010 01 Žilina,

Lactic acid bacteria (LAB) are generally regarded as safe (GRAS) in food production and are widely used as components of started cultures for preparation of fermented diary products with improved preservation properties, characteristic flavours and textures, different from the original food. Some of LAB produce exopolysaccharides (EPS), which have found their most valuable application as viscosifying, stabilising, emulsifying and gelling agents improving the rheology, texture and 'mouthfeel' of fermented milk products.

Recently a growing interest has been observed in EPS-producing LAB. From the point of view of a physiological benefit for a host, EPSs remain longer in gastrointestinal tract enabling thus enhancing colonization by probiotic bacteria [1,2]. In addition LAB EPSs have beneficial effect on the health, they have been claimed to have antitumor effect and immunostimulatory activity. The culture of Lactococcus lactis ZS25 isolated from Liptauer cheese (bryndza, mountain sheepfolds of Slovakia) has been studied. Phenotypically, isolates are very similar to Lactococcus lactis. During the fermentation process Lactococcus lactis ZS25 formed viscous and slime medium. The production of extracellular polysaccharides and rheological properties of fermented milk have been investigated.

The work was supported by APVT-2-017304 and the State research and development program No.003 SP270280E010280E01

[1] Vuyst L. D. and Degeest B.: FEMS *Microbiol. Rev.*, 23, 153-177, 1999.
[2] Cerning J.: *Lait 75*, 463-472, 1995.

5Po42

ISOLACE β-GLUKANŮ Z JEDLÝCH HUB

Míčková K., Blafková P., Černá J., Čopíková J., Synytsya Andriy., Synytsya Alla, Spěváček J., Jablonský I., Erban V.

Ústav chemie a technologie sacharidů, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6 - Dejvice, Česká Republika, e-mail: katerina.mickova@vscht.cz

Jedlé houby jsou známy svými příznivými účinky na lidské zdraví a dlouhověkost už po celá staletí. Tyto účinky bývají přisuzovány především β-glukanům, homo- a heteroglukanům s β(1→3), β(1→4) a β(1→6) glykosidovými vazbami. β-Glukany hrají klíčovou roli ve zvýšení funkce makrofágů a tím ochraně buněk proti virovým, bakteriálním a jiným parazitickým infekcím. Z dalších účinků je významná redukce hladiny cholesterolu a glukosy v krvi [1]. Kromě těchto polysacharidů obsahují houby velké množství chitinu, hemicelulóz a mannanů, které jako hlavní složky vlákniny působí svými gelotvornými vlastnostmi při různých onemocněních gastrointestinálního traktu. *Pleurotus ostreatus* (Hlíva ústřičná) je jednou z jedlých hub, u nichž je obsah β-glukanů velmi významný.

V této práci byly studovány rozdíly v obsahu polysacharidů, zejména pak β-glukanů v různých kmenech hlívy ústřičné a různých částech plodnice (klobouku a třeni). Pro izolaci β-glukanů byla použita modifikovaná metoda podle Freimunda [2], která zahrnuje extrakci 80 % ethanolem, vodou za varu a následně i alkalickou extrakci směsí 1M NaOH a 0,05% NaBH4. Během izolace bylo nutné odstranit glukany vázané α-glykosidovými vazbami a dále také bílkoviny. Nízkomolekulární látky byly z extraktu odstraněny dialýzou. Poté následovala lyofilizace dialyzátů. U lyofilizovaných vzorků byla proměřena IČ a NMR spektra. Obsah β-glukanů byl stanoven jako 1,3:1,6-β-glukany enzymovým setem KYBGL 11/2003 (Megazyme, Irland), a to jak v lyofilizátech, tak v čerstvých vzorcích hub. Bylo zjištěno, že obsah β-glukanů je větší v třeni než v klobouku. Přitom výrazné změny mezi jednotlivými kmeny hlívy ústřičné v obsahu β-glukanů zjištěny nebyly.

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České Republiky (projekt GAČR 525/05/0273).

[1] Manzi P., Pizzoferrato L.: *Food Chemistry 68*, 315-318 (2000)
[2] Freimund S., Sauter M., Käppeli O., Dutler H.: *Carbohydrate Polymers 54*, 157-171 (2003)

5Po43

STUDY OF ANTIMUTAGENIC AND ANTIOXIDATIVE CHARACTERISTICS OF NATURAL FRUIT AND VEGETABLE JUICES

Mikulcová A., Macuchová S., Tihlářová E., Chvátalová R., Ptáček P., Kubešová J., Márová I.

Department of Food Chemistry and Biotechnology, Faculty of Chemistry, Brno University of Technology, Purkyňova 118, 612 00, Czech Republic, e-mail: mikulcova@fch.vutbr.cz

Many fruit and vegetables are good sources of natural antioxidants with inhibiting effects against mutagenesis and carcinogenesis. Diet is the complex mixture containing mutagens and carcinogens with antimutagens and anticarcinogens. Mutagen is a substance causes molecular changes in genomic DNA structure which are called mutations. The incidence of mutations can be reduced by antimutagens. The oxygen free radicals and lipid peroxidation processes have an important role in the induction of mutagenesis and carcinogenesis. In the protection against negative affecting of oxygen free radicals many types of antioxidants are included. The low molecular compounds in the diet are involved in the antioxidant system of organism, too. The composition of diet and food fortification are the significant ways to control the occurrence of mutations and cancer.

This work is focused on study of antimutagenic and antioxidant effects of several sorts of natural fruit/vegetable juices. Biological activity of juices was compared with content of flavonoids (rutin, quercetin, morin), β-carotene, ascorbic acid, tocopherol. The content of active compounds of juices was analyzed by HPLC.

Using ABTS method the total antioxidant status of natural juices was determined. The highest values of the antioxidant activity were found in the blueberry, blackberry and raspberry juices, the lowest values of the antioxidant activity were found in the carrot and the pineapple juices.

In vitro tests with yeast *Sacharomyces cerevisiae D7* and protozoon *Euglena gracilis* the antimutagenic effects of juices against standard mutagens were studied. In both microbial tests the highest antimutagenic activity was observed in the strawberry, blueberry and blackberry juices. No correlation between antimutagenic effect of the fruit/vegetable juices and their antioxidant activity was found.

Acknowledgment: This work was supported by the project MSM 0021630501 of the Czech Ministry of Education, Youth and Sports.

[1] Hao Chen, Yuegang Zuo, Yiwei Deng: *Journal of Chromatography A, 913*, 387-395, (2001)
[2] Giorgio Bronzetti: *Trends in Food Science & Technology, 5*, 390-395, (1994)

5Po44

SELEKTIVNÍ SORPCE Ge, Mo, V A W POMOCÍ SORBENTU S DIETHANOLAMINOVOU FUNKČNÍ SKUPINOU NA AKRYLÁTOVÉM SKELETU

Richard Burda, Eva Mištová, Zdeněk Matějka, Luděk Jelínek, Martin Hrubý*, Milan Beneš*

Ústav energetiky, FTOP, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6
**Ústavu makromolekulární chemie AVČR, Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6*
e-mail: burdar@vscht.cz

V této práci byl použit experimentální sorbent s glycidylmethakrylát-co-ethylendimethakrylátovým skeletem a diethanolaminovou funkční skupinou pro selektivní sorpci oxoaniontů Ge, Mo, V a W z roztoku. Cílem práce bylo otestovat použitelnost sorbentu, stanovení optimálních podmínek sorpce a zhodnocení vlivu doprovodných aniontů (chloridy, sírany).

Principem sorpce je komplexotvorná reakce mezi odstraňovaným kovem a OH skupinami sorbentu. Odstraňované kovy se v roztoku v závislosti na pH a koncentraci kovu vyskytují v různých formách polyoxoaniontů. OH skupiny pak v reakci vystupují jako donory volných elektronových párů přítomných na kyslíkových atomech.

Vedle již zmiňovaného sorbentu s diethanolaminovou funkční skupinou byl pro srovnání použit sorbent s ethanolaminovou funkční skupinou a sorbent Purolite D3441 (na styren-divinylbenzenovém skeletu diethanolamin). Narozdíl od sorbentů se styren-divinylbenzenovým skeletem u sorbentů s akrylátovým skeletem dochází při výrobě ke vzniku OH skupiny, která pak v některých případech výrazně ovlivní sorpční schopnosti daného sorbentu.

V: sorbent v protonizované formě selektivně zachycuje vanad nejlépe při pH = 5

W: sorbent v protonizované formě selektivně zachycuje wolfram v rozsahu pH = 3,5 - 7

Mo: sorbent není vhodný pro sorpci Mo - nízká selektivita

Ge: ve formě volné base sorbent selektivně zachycuje Ge z alkalických roztoků

Tato práce vznikla za podpory Výzkumného záměru MŠMT České Republiky MSM 6046137304.

[1] Cavani F., *Catalysis Today*, 41, 73-86, (1998)
[2] Mikešová M., Bartušek M., *Coll.C.Chem.Commun*, 44, 3257-3263, (1979)
[3] Ozawa I., Saito K., Sugita K., Sato K., Akiba M., Sugo T., Journal of Chromatography, A 888, 43-49, (2000)

5Po45

POROVNANIE ÚČINKU ANORGANICKÝCH A ORGANICKÝCH SORBENTOV PRI ZNIŽOVANÍ FYTOTOXICITY KADMIA

Janette Musilová, Radovan Stanovič, Alena Vollmannová, Ladislav Lahučký, Silvia Melicháčová

Katedra chémie, Fakulta biotechnológie a potravinárstva, Slovenská poľnohospodárska univerzita, Tr. A. Hlinku 2, 949 76 Nitra, e-mail: musilova@afnet.uniag.sk

Predmetom práce bolo sledovanie vplyvu anorganických a organických sorbentov na fytotoxicitu kadmia. Pokusy sa realizovali v prirodzených podmienkach ako nádobové pokusy. Vplyv sorbentov sme sledovali na testovanej plodine jačmeň jarný. Kadmium sme aplikovali vo forme empirického roztoku $CdCl_2$ .2 1/2 H_2O. Organický sorbent Teravita je univerzálny substrát pre zakladanie pestovateľských plôch vyrobený z rašeliny a prírodných látok. Má prirodzený obsah humusových a živín nedoplňovaných umelými prísadami. Anorganický sorbent alginit je organicko - minerálna hornina, ktorá obsahuje v podstate primárne a sekundárne alumosilikáty, ktoré s najväčšou pravdepodobnosťou budú limitovať ďalšie fyzikálne a chemické vlastnosti tejto horniny[1]. V sledovanej plodine sa prejavil vplyv kadmia. Hmotnosť nadzemnej fytomasy sa v porovnaní s kontrolou NPK znížila vo všetkých variantoch.

Porovnaním vplyvu minerálneho sorbentu a organickej hmoty na fytotoxicitu kadmia sa pozitívny vplyv na tvorbu fytomasy prejavil len vplyvom organickej hmoty v porovnaní s variantom, kde bolo kadmium aplikované samostatne. Pridaním alginitu sa hmotnosť fytomasy znížila (je to vysvetlené skladbou). [2] Preto možno konštatovať, že organická forma sorbentu je výhodnejšia ako alginit, čo dokazujú všetky nádobové pokusy, v ktorých sme porovnávali tieto dva sorbenty. Kombinácia kadmia s organickým sorbentom mala pozitívny vplyv na zníženie obsahu kadmia v sušine nadzemnej fytomasy. Výsledkom možno konštatovať rozdielnu schopnosť organickej hmoty zachytávať iónovú zložku toxického prvku [3].

[1] Ducsay, L., Kulich, J., Kabátová, A.: Testovanie účinnosti teravity pre zníženie fytotoxických účinkov niektorých sledovaných prvkov. In: Environmentálne problémy miest. Košice, Dom techniky 1997, s. 170 - 174.

[2] Kočík, K., Ducsay L.: Vplyv rôznej koncentrácie kadmia na klíčivosť, tvorbu biomasy a syntézu chlorofylu vybraných poľnohospodárskych plodín. In: Acta facultatis ecologiae. Zvolen, TU 1999, s. 189 - 205.

[3] Kulich, J.: Príspevok k poznatkom o fytotoxicite kadmia. Poľnohospodárstvo, 35, 1989, č.2, s. 114-121.

5Po46

PŘÍPRAVA HUMINOVÝCH LÁTEK OXIDACÍ UHLÍ

Jaromír Novák, Josef Kozler, Barbora Antošová

Technická univerzita v Liberci, Hálkova 6, 461 17 Liberec, Česká republika
e-mail: jaromir.novak@vuanch.cz

Huminové látky (HS) mají nezastupitelnou roli v půdním prostředí, kde zprostředkovávají přenos živin, spoluvytvářejí strukturu půd a působí jako nespecifický růstový stimulátor na rostliny. Tuto vlastnost HS je vhodné využít na plochách, kde se provádějí rekultivace po těžbě přírodních surovin. Jako vhodnou surovinu lze použít přírodní oxyhumolity s vysokým obsahem huminových kyselin (HA). Oxyhumolity jsou však zpravidla zpracovávány na alkalické humáty a jejich majitelé požadují za tuto surovinu vysoké ceny, které by rekultivace neúměrně prodražily. Proto byla zkoumána možnost využít pro účely rekultivací odpadní uhlí a v nich zvýšit obsah HS oxidací.

K oxidaci bylo použito uhlí z nadloží uhelné sloje lomu Družba (Sokolovská uhelná pánev), které obsahovalo v sušině cca 10 % loužitelných HS. Jako oxidační činidlo byla použita kyselina dusičná. Byl zkoumán vliv teploty, doby reakce, koncentrace kyseliny dusičné a poměr pevné a kapalné fáze v reakční směsi.

Obsah loužitelných HS byl zvýšen až na 80 % z celkové organické hmoty ve směsi. Z tzv. nitrohuminových kyselin připravených oxidací byly po alkalické extrakci získány vzorky humátu draselného, u nichž byla testována biologická aktivita. Bylo zjištěno, že je srovnatelná s biologickou aktivitou humátu draselného připraveného z kvalitních oxyhumolitů.

Tato práce vznikla v rámci řešení projektu 1M4674788502 s podporou MŠMT ČR spadajícího do programu výzkumu a vývoje PPZ-DP01.

5Po47

LIGNITE FILAMENTOUS FUNGI- ISOLATION, CHARACTERIZATION AND INDUCTION OF RESISTANCE

Petra Olejníková, Zuzana Ondrušová, Richard Pokorný, Daniela Hudecová, Ľudovít Varečka

Department of Biochemistry and Microbiology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 81237-Bratislava, Slovakia;
e-mail: daniela.hudecova@stuba.sk

Microorganisms were isolated under sterile conditions excluding air and soil contamination from coal mine Záhorie. The number of colony forming units after 7-days cultivation on standard growth media was 10^6. Isolates were identified by morphological criteria as well as by their ITS sequences (ITS2-ITS4). They were identified as *Trichoderma spp., Paecilomyces spp., Epicoccum spp., Penicillium*

spp., and *Cladosporium spp.* These fungal isolates were tested for their sensitivities to commercial antifungal agents (propiconazole, fluconazole, benomyl, ramihyfin, mancozeb), and compared to those of genetically similar recent fungal strains (*T. viride, T. atroviride, E. nigrum, P.funiculosum, C. herbatum*). Benomyl had the highest antifungal activity against all filamentous fungi (IC_{50}=0,5 - 1 µg/ml). No relevant differences in susceptibility among strains were observed except *Penicillium* and *Peacilomyces species*. Isolates 5a (*Penicillium spp*). and 9a (*Paecilomyces spp.*) were more sensitive to propiconazole than the recent *Penicillium funiculosum* and *Paecilomyces farinosus*.

Resistance to benomyl was induced by UV irradiation only in isolates T (*Trichoderma spp*) and 9a (*Paecimolyces spp*). Irradiated strains displayed high resistance to benomyl (500 µg/ml for isolate T (*Trichoderma spp*) and 100 µg/ml for isolate 9a (*Paecimolyces spp.*) After five passages on growth medium without benomyl, these fungal strains could still grow on high benomyl concentrations.

Presented results show that microorganisms isolated from the low-rank coal (extreme conditions) may have properties different from those of recent strains of the same species.

This work was supported by Science and Technology Assistance Agency under the contract No.APVT-20-003904

5Po48

LIGNITE FUNGI: SOME CHARACTERISTICS OF THEIR METABOLISM

Zuzana Ondrušová, Petra Olejníková, Ľudovít Varečka, Daniela Hudecová

Department of Biochemistry and Microbiology, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia, zuzana.ondrusova@stuba.sk

Filamentous fungi, described in this work, were isolated from lignite coalmine Záhorie under sterile conditions and were identified by their ITS sequences (ITS2 - ITS4) and by morphological criteria [1]. For our study, three isolates: isolate T - *Trichoderma sp*., isolate 9a - *Paecilomyces sp.* and isolate 9b - *Epicoccum sp.*, were selected.

At first, metabolite profile of these lignite fungal strains and their related recent species (*Trichoderma atroviride, Paecilomyces farinosus, Epicoccum nigrum*) were compared. Microbial extracts were and continue to be a productive source of new biologically active molecules. For this purpose, the antibacterial activity of isolated metabolites against *Staphylococcus aureus*, *Bacillus subtilis and Escherichia coli* was determined by disc-diffusion method. After cultivation of fungi, the metabolites were extracted in ethyl acetate from growth medium. These extracts were subjected to a thin layer chromatography, developed in saturated chambers, dried and examined in daylight and under UV light (254 nm). The TLC strips were then tested for antibacterial acitivity, the active compound was characterized by autobiographical method.

The next part of our work was to determine the growth of lignite fungi on some organic acids of tricarboxylic acid cycle (succinate, citrate, α-ketoglutarate) as a sole carbon source, also to determine production and spectrum of organic acids by HPLC method. Finally in this work, the succinate transport across biological membranes of isolate T - *Trichoderma sp.* as well as recent species *Trichoderma atroviride* were studied.

This work was supported by the Slovak Grant Agency VEGA, grant No. 1/0109/03.

[1] Olejníková P., Pokorný R., Hudecová D., Varečka Ľ,: *Bulletin Československé společnosti mikrobiologické, XXXXV,* 85, (2004)

5Po49

CHEMICKY MODIFIKOVANÉ ZEOLITY. ČASŤ I. ZNIŽOVANIE OBSAHU OXIDU DUSNATÉHO VO VÝFUKOVÝCH PLYNOCH ZÁŽIHOVÝCH MOTOROV

Peter Oravec[a], Iveta Pandová[a], Jozef Mačala[b]

[a] *Katedra manažmentu výroby, FVT TU Košice so sídlom v Prešove, Bayerova 1, 080 01 Prešov, e-mail: oravec.peter@fvt.sk*
[b] *Katedra mineralurgie a environmentálnych technológií, FBERG TU Košice, Park Komenského 19, 043 84 Košice*

V súčasnosti je doprava jednou z hlavných oblastí, ktorá sa veľkou mierou podieľa na znečisťovaní ovzdušia. Ide hlavne o emisie oxidu uhoľnatého, oxidov dusíka, uhľovodíkov a vysoký obsah sadzí v plynoch vznetových motorov. Využitie zeolitov pre znižovanie obsahu toxických zložiek výfukových plynov spaľovacích motorov je predmetom výskumu viacerých pracovísk vo svete [1-3].

Prírodný zeolit z lokality Nižný Hrabovec bol po jednoduchej chemickej úprave použitý ako adsorbent na zachytávanie toxických zložiek výfukových plynov. Pomocou prototypu filtračného zariadenia naplneného modifikovaným zeolitom bol sledovaný obsah oxidu dusnatého (NO) meraním prenosným detektorom plynov SMART LOGGER. Cieľom práce bolo zistiť vplyv a efektívnosť chemicky modifikovaného prírodného zeolitu pomocou chloridu amónneho, chloridu kobaltnatého a síranu meďnatého na adsorpciu NO vo výfukových plynoch zážihového motora ŠKODA 120.

Z nameraných výsledkov bola vypočítaná účinnosť filtračno-adsorpčného zariadenia pre všetky druhy vzoriek chemicky modifikovaných prírodných zeolitov. Ukázalo sa, že najvyššiu účinnosť v adsorpcii NO vykazuje zeolit modifikovaný NH_4Cl (o 37 % vyššiu ako nemodifikovaný zeolit), nasleduje modifikácia s $CoCl_2$ (o 24 % vyššiu), kým úprava pomocou $CuSO_4$ zvýšila obsah NO v plynoch v porovnaní s nemodifikovanou vzorkou.

Zvyšovanie sorpčných a katalytických vlastností

chemicky modifikovaných zeolitov je predmetom ďalšieho výskumu.

Tento príspevok je súčasťou riešenia grantovej úlohy 1/1122/04 financovanej Vedeckou grantovou agentúrou SR.

[1] Patent Cooperation Treaty: WO 97/22404, 26.6.1997.
[2] United States Patent: US006024781A, 15.2.2000.
[3] Suchá M., Gondová T., Pandová I., Florián K., Reiffová K., Oravec P., Mačala J.: *Chem. Listy 96*, 521 (2002).

5Po50

DYNAMIKA REGULAČNÍCH ENZYMŮ BUNĚČNÝCH PROCESŮ CDK2 A CDK5 STUDOVANÁ MOLEKULOVOU DYNAMIKOU

Michal Otyepka[1], Iveta Bártová[1,2], Zdeněk Kříž[2], Jaroslav Koča[2]

[1]Katedra fyzikální chemie a Centrum biomolekul a komplexních molekulových systémů, Universita Palackého, tř. Svobody 26, 771 46 Olomouc, ČR, e-mail: otyepka@aix.upol.cz;
[2]Národní centrum pro výzkum biomolekul, Masarykova Universita, Kotlářská 2, 611 37 Brno, ČR

Cyklin-dependentní kinázy (CDK) jsou enzymy podílející se na regulaci řady významných buněčných procesů např. buněčného cyklu, apoptózy, diferenciace neuronálních buněk atp. CDK sestávají ze dvou podjednotek, katalytické podjednotky, kinázy a regulační podjednotky, cyklinu. Aktivita těchto enzymů je na molekulární úrovni řízena vazbou cyklinu a fosforylací aktivačních míst popř. defosforylací inhibičních míst. Jediný člen rodiny CDK a to CDK5 z tohoto schématu vybočuje, navzdory jeho vysoké homologii (60%) s CDK2 a dalšími enzymy z rodiny CDK. CDK5 není aktivována cyklinem ale regulačním enzymem p35 resp. p39 a navíc je tento komplex plně aktivní a nevyžaduje další aktivaci fosforylací, jako je tomu u ostatních CDK [1-3]. Navíc se ukazuje, že fosforylace v glycinové smyčce (G-smyčce), která je pro CDK2 inhibiční, je pro CDK5 spíše stimulační. Strukturní aspekty regulace fosforylací G-smyčky byly nedávno odhaleny právě molekulovou dynamikou (MD). O mechanismu aktivace fosforylací v G-smyčce CDK5 nedávno spekuloval v literatuře Mapelli a kol. [3] a to zejména s ohledem na vazbu inhibitoru roskovitinu v aktivním místě enzymu. Příspěvek bude diskutovat rozdíly v interakčních energií inhibitoru s CDK2 resp. CDK5 a dále rozdíly v interakcích mezi CDK a její regulační podjednotkou s cílem pochopit, rozdílný mechanismus regulace CDK5.

Poděkování autorů patří MŠMT za finanční podporu (I.B., Z.K., J.K. grant MSM0021622413, M.O. granty MSM6198959216, LC05A57) a MetaCentru za výpočetní čas.

[1] Mapelli, M., Musacchio A.: Neurosignals 12, 164-172 (2003).
[2] Tarricone, C., R. Dhavan, a kol.: Molecular Cell 8, 657-669 (2001)..
[3] Mapelli, M., L. Massimiliano, a kol.: J. Med. Chem. 48, 671-679 (2005).

5Po51

DISUBSTITUOVANÉ PYRAZOLO [4,3-D]PYRIMIDINY S ANTIPROLIFERAČNÍM ÚČINKEM

Martina Paprskářová[a], Vladimír Kryštof[a], Miroslav Strnad[a], Daniela Moravcová[b], Libor Havlíček[b]

[a] Laboratoř růstových regulátorů, Přírodovědecká fakulta University Palackého & Ústav experimentální botaniky AV ČR, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc, Česká republika, e-mail: krystof@aix.upol.cz;
[b] Izotopová laboratoř, Ústav experimentální botaniky AV ČR , Vídeňská 1083, 142 20 Praha, Česká republika

Mezi cíleně vyvíjená moderní chemoterapeutika patří dnes inhibitory proteinkinas, jejichž funkce v kontextu fyziologickém i patologickém intenzivně studuje řada výzkumných pracovišť. Jedním z významných cílů nové generace protinádorově aktivních látek se tak staly rovněž cyklin-dependentní kinasy (CDK), které se podílejí na regulaci buněčného dělení, diferenciace i apoptózy [1, 2]. Některé z nich (např. purinový derivát roskovitin) se dokonce již nacházejí ve druhé fázi klinického testování účinnosti proti vybraným nádorovým onemocněním [2]. Vývoj specifických inhibitorů CDK probíhá dále a protože modifikace jednotlivých substituentů na purinové kostře jsou již velice podrobně popsány, věnujeme se v současnosti jiným způsobům modulace aktivity inhibitorů. Zaměřili jsme se mimo jiné na syntézu a studium aktivity příbuzných 3,7-disubstituovaných pyrazolo[4,3-*d*]pyrimidinů [3]. Ve srovnání s analogickými disubstituovanými puriny vykazují silnější antiproliferační účinky na řadě buněčných nádorových liniích, která je evidentně spojena s inhibicí CDK. Některé ze těchto sloučenin však překvapivě interagují také s mikrotubulární sloužkou cytoskeletu, způsobují jeho rozpad, blok buněčného cyklu na přechodu G2/M a rovněž indukují buněčnou smrt. Kombinovaný účinek pyrazolo[4,3-*d*]pyrimidinů na CDK a mikrotubuly/tubulin se tak může jevit jako zajímavý terapeutický nástroj.

Práce vznikla díky podpoře grantů GA AV ČR KJB4038301 a GA ČR 204/03/D231.

[1] Sielecki T.M., Boyan J.F., Benfield P.A., Trainor G.L.: *J. Med. Chem., 43,* 1-18 (2000).
[2] Meijer L., Raymond E.: *Acc. Chem. Res., 36,* 417-425 (2003).
[3] Moravcová D., Kryštof V., Havlíček L., Moravec J., Lenobel R., Strnad M.: *Bioorg. Med. Chem. Lett., 13*, 2989-2983 (2003).

5Po52

VITAMIN E INFLUENCE ON ANTIOXIDANT STATUS IN ACUTE POISONING OF RABBITS

[a]K. Pawłowska-Góral, [a]M. Wardas, [b]P. Wardas, [a]A. Rzepecka-Stojko

[a] *Department of Food and Nutrition, Pharmacy Faculty, Silesian Academy of Medicine, 41-200 Sosnowiec, Jagiellonska 4 Street, Poland, phone: (0048) (32) 29 23 335, fax: (0048) (32) 26 67 860*
[b]*E. N. T Clinic of Silesian Academy of Medicine, Katowice, Poland, e-mail: katarzynagor@wp.pl*

CCl_4 is a substance that induces lipid peroxidation and oxidative damage. The aim of our research was the estimation of oxidative stress caused by the presence of vitamin E [1,2]. The research was carried out on 25 Chinchilla rabbits divided into 5 groups. By means of stomach tube the rabbits were administered CCl_4 and vitamin E in different combinations. On 3rd, 9th and 14th day of the experiment we marked the activity of antioxidative enzymes: superoxide dysmutase (SOD), glutathione peroxidase (GPx) and glutathione reductase (GR) the value of total antioxiant status (TAS), concentration of malonic dialdehyde (MDA) and glutathione (GSH) in plasma or whole blood of the rabbits from all groups. It was stated that the administration of CCl_4 causes the increase of the activity of SOD (about 150%) and the decrease in the activity of GPx and GR (about 50%). These changes were accompanied with the increase in TAS value and MDA concentration and the decrease in GSH concentration. The administration of CCl_4 preceded by 7 day administration of vitamin E or both substances simultaneously caused the normalisation of the examined parameters. Our results indicate that the oxidative stress caused by CCl_4 is accompanied by the development of reactive oxygen forms, especially superoxide radical anion.

[1] Stoyanowski, D.A., and Cederbaum, A.I.: *Chem. Res. Toxicol.* 12, 730-736 (1999)
[2] Sun, F., Hamagawa, E., Tsutsui, C., Ono, Y., Ogiri, Y., and Kojo, S.: *Biochim. Biophys. Acta* 1535, 186-191 (2001)

5Po53

ENVIROMENTÁLNÍ ASPEKTY POUŽITÍ ZKAPALNĚNÉHO UHLOVODÍKOVÉHO PLYNU V PRŮMYSLU A ENERGETICE

Ondřej Prokeš, Daniela Římanová

Vysoká škola chemicko - technologická v Praze, Ústav plynárenství, koksochemie a ochrany ovzduší; Technická 5; 166 28 Praha 6; Česká republika; e-mail: ondrej.prokes@vscht.cz

V příspěvku bude představen zkapalněný uhlovodíkový plyn používaný v různých oblastech průmyslových odvětví a energetice. I když historie zkapalněných uhlovodíkových plynů sahá až k začátkům minulého století, je tento obor stále živý s mnoha technickými novinkami. Na začátku přednášky budou uvedeny základní typické parametry zkapalněného uhlovodíkového plynu, tzn. jeho složení, termodynamické a fyzikálně - chemické vlastnosti apod.

Zkapalněné uhlovodíkové plyny nacházejí uplatnění v mnoha oblastech lidské činnosti. Kromě průmyslového využití lze najít aplikace např. i v oblasti rekreace (grily, hausbóty, lodě, balónové létání apod.). Celková spotřeba LPG ovšem pro tyto činnosti je zanedbatelná a nepředstavuje významný ani obchodní ani technický přínos. Z tohoto důvodu autoři představí hlavní oblasti použití LPG právě s důrazem na průmyslové aplikace, kde jsou předpoklady velkého odbytu, ale zároveň jsou kladeny vysoké technické nároky. Ke každé aplikaci budou uvedeny základní kvalitativní a kvantitativní požadavky na LPG a jeho hlavní výhody a nevýhody ve srovnání s ostatními palivy; plynnými (zemní plyn, bioplyn apod.) popř. i pevnými (uhlí, lignit atd.). Neopomenutelnou součástí přednášky bude i aplikace použití LPG pro pohon motorových vozidel. Tato oblast je v současné době široce diskutována, především z důvodu zavedení minimálního podílu alternativních paliv v dopravě. V této oblasti se předpokládá, že dojde k náhradě 20 až 23 % alternativními palivy do roku 2020, přičemž právě LPG představuje jednu z možných alternativ.

5Po54

HNOJIVA SE SNÍŽENÝM VYPLAVOVÁNÍM ŽIVIN

Lada Robešová, Ladislav Svoboda, Jan Kühn

Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Katedra anorganické technologie, nám. Čs.legií 565, 532 10 Pardubice,Česká republika, e-mail: lada.robesova@upce.cz

Úkolem chemizace zemědělství je zajistit dostatečné množství kvalitních potravin při současné minimalizaci negativních zásahů do životního prostředí. K dosažení co nejvyšších výnosů zemědělských plodin je zapotřebí, aby půda byla bohatá na živiny, které hrají klíčovou roli v metabolismu rostlin a ovlivňují jejich růst. Jedním z významných zdrojů živin jsou i průmyslová hnojiva. Na počátku 90. let 20 století došlo k prudkému poklesu spotřeby umělých hnojiv v České republice. V roce 2003 činila 89,7 kg čistých živin NPK na ha zemědělské půdy [1], což je hluboko pod hektarovou spotřebou ve vyspělých zemích EU - cca 180 kg/ha [2]. Snížení spotřeby průmyslových hnojiv je však nerovnoměrné a některé plodiny jsou jimi hnojeny poměrně intenzivně, např. kukuřice, řepka, pšenice a cukrovka [3].

Nadměrné hnojení má za následek, že cca 50% dodaných živin je využito rostlinami, zbytek odchází do podzemních a povrchových vod, případně do ovzduší. Tento jev je možné potlačit například používáním obalovaných hnojiv. Obalovaná hnojiva mají řadu výhod: snižují ztráty živin vyplavováním, umožňují použití vyšších dávek hnojiv a zjednodušení systému hnojení. K obalování hnojiv jsou na výzkumném pracovišti Univerzity Pardubice používány

různé typy přírodních a syntetických vosků a mikrovosků. Tloušťkou obalu se ovlivňuje rychlost uvolňování živin do půdního roztoku. Například obal o tloušťce 5 hm.% zpomalí tento proces až 40krát.

[1] D-1.7 Spotřeba průmyslových hnojiv na 1 ha zemědělské půdy, Český statistický úřad, www.czso.cz/eng/edicni-plan.nsf/t/65003B2BC5/$File/D107.pdf
[2] Spotřeba průmyslových hnojiv loni v zemědělství klesla o 14%, Asociace soukromých zemědělců, www.asz.cz/ochrana/detail.php?id=2262&iSub=-5&iMaster=
[3] Environmentální aspekty zemědělství, Strukturální fondy Evropské unie, www.strukturalni-fondy.cz/index.php?show=00000800100100500300200803 1

5Po55

VYUŽITÍ OXIDAČNĚ-REDUKČNÍCH TECHNOLOGIÍ K SANACI VOD A PŮD KONTAMINOVANÝCH ORGANICKÝMI LÁTKAMI A TĚŽKÝMI KOVY

Alena Rodová[1], Tomáš Pittner[1], Lenka Veselá[2], Petra Žáčková[2]

[1]Výzkumný ústav anorganické chemie, a. s., Revoluční 84, 400 01 Ústí nad Labem, Česká republika, e-mail: alena.rodova@vuanch.cz,
[2]DEKONTA, a. s., Ústí nad Labem, pracoviště Dřetovice 109, 273 42 Stehelčeves, Česká republika, e-mail: vesela@dekonta.cz

Procesy na bázi oxidačně-redukčních dějů lze uplatnit při sanaci medií kontaminovaných řadou polutantů. V rámci projektu jsou studovány a porovnávány technologie odstraňování toxických kovů (arsen, chróm) [1] a širokého spektra organických látek (PCB, TCE, PCE, PAU, atd.) [2] z vod a půd z lokalit v České republice. Testy redoxních činidel z tuzemska i od zahraničních dodavatelů probíhají v rozsahu laboratorních zkoušek až pilotních ověření přímo na vybraných lokalitách.

Prezentace je věnována metodám stabilizace kovů a rozkladu chlorovaných uhlovodíků následujícími činidly:

1. kovové železo a litina - umožňuje odstranit iont Cr^{6+} z roztoku s účinnosti až 99,9 %. Účinnost a rychlost rozkladu halogenovaných uhlovodíků je závislá na typu uhlovodíku, u TCE bylo dosaženo 97 %.
2. činidla uvolňující kyslík - jsou směsí MgO, MgO_2, $Mg(OH)_2$ a stabilizátorů. V laboratorních podmínkách bylo dosaženo účinnosti odstranění arzénu až 99,9 %.
3. činidla na bázi síry (polysulfidy, pyrosiřičitany) - umožňují odstraňování iontů Cr^{6+} z roztoku. Aplikací polysulfidu vápníku bylo dosahováno účinnosti odstranění vyšší než 99 % v širokém spektru pH kontaminované vody.
4. bakterie redukující sírany - produkují sulfan, jehož pomocí lze redukovat a srážet. iont Cr^{6+} ve formě sulfidů. Pomocí kmenů Desulfovibrio desulfuricans a Desulfovibrio vulgarits bylo dosaženo účinnosti odstranění chrómu vyšší než 99 %.

Řešeno s podporou Ministerstva průmyslu a obchodu ČR, evidenční číslo projektu : FD-K3/025.

[1] Rodová A. a kol.: Výzkum a vývoj chemických oxidačních technologií k sanaci zemin a vod znečištěných organickými látkami polyaromatického a alifatického charakteru a těžkými kovy II., výzkumná zpráva VÚAnCh VZ-S-1499, 2004.
[2] Veselá L., Šváb M., Sochorová V.: Výzkum a vývoj chemických oxidačních technologií k sanaci zemin a vod znečištěných organickými látkami polyaromatického a alifatického charakteru a těžkými kovy - závěrečná zpráva - roční etapa 2004, CVZ 765, DEKONTA, 2004.

5Po56

ROZDĚLOVACÍ KOEFICIENT N-OKTANOL/VODA KOV A TOXICITA BINÁRNÍCH SMĚSÍ

M. Rucki, M. Tichý, Z. Roth

Státní zdravotní ústav, Šrobárova 48, 100 42 Praha10, Česká republika
e-mail: ruckim@yahoo.com

Toxický účinek čistých látek je poměrně dobře znám pro několik tisíc sloučenin. Ve skutečných podmínkách je však expozice jedné látce spíše výjimkou, ve většině případů se jedná o expozici směsi látek. Zde může nastat několik případů vzájemného ovlivňování a výsledný efekt může být potenciace, inhibice, nezávislost účinku nebo i jejich kombinace.

Pro studování vzájemného ovlivňování toxicity látek ve směsi byl použit test akutní toxicity na oligochaeta *Tubifex tubifex* (EC50). Jako vhodný fyzikálně chemický deskriptor rozdělovací koeficient n-oktanol/voda K_{ow}. Cílem je porovnat podobnosti nebo rozdíly v závislosti indexu akutní toxicity EC50 a rozdělovacího koeficientu Kow a koeficientu distribuce Kmix [1] na molárním zlomku R. Byl proměřen Kow i Kmix při koncentracích EC50 smesi, které nejsou stejné. Proto je také diskutován vliv celkové koncentrace látek ve směsi na hodnotu Kow.

Tato práce byla vypracována za podpory projektů GA ČR 305/03/P018, GA ČR 305/03/1169 a IGA MZ ČR NJ7435-3

[1] H.J.M. Verhaar, F.J.M. Busser, J.L.M. Hermens: *Environ. Sci. Tech., 29*, 726-734 (1995).

5Po57

PŘEDKONCENTRACE TERGITOLU Z REÁLNÝCH VZORKŮ VOD POMOCÍ MAGNETICKÝCH ADSORBENTŮ

[1]Šafaříková, M., [1]Luňáčková, P., [1]Kibriková, I., [2]Komárek, K., [2]Hubka, T., [1]Šafařík, I.

[1]Ústav ekologie krajiny AV ČR, Na Sádkách 7, 370 05 České Budějovice, mirkasaf@uek.cas.cz
[2] Univerzita Pardubice, Nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice

Spotřeba a produkce povrchově aktivních látek stále stoupá a jejich široké použití má za následek výskyt těchto látek a jejich reziduí v životním prostředí. Stanovení tenzidů (zejména v nízkých koncentracích) ve vodách patří k náročnějším analytickým postupům. Proto byla metoda extrakce magnetickou tuhou fází, využívající magnetických sorbentů, studována jako alternativní metoda pro předkoncentraci neionického tenzidu Tergitolu (oxyethylovaný nonylfenol NP-9EO) z různých vzorků vod.

Tergitol byl extrahován z vodovodní, studniční, říční a rybniční vody pomocí magneticky modifikovaných adsorbentů Tenax TA, Tenax GR a polyfenylenoxid (PFO) s následným spektrofotometrickým stanovením. Adsorpční kapacity byly 111.7 mg/g (PFO), 29.6 mg/g (Tenax TA) a 47,2 mg/g (Tenax GR). Výtěžnosti extrakce tergitolu (výchozí koncentrace 30 Ķg/ml) na všech typech sorbentů z 10 ml destilované vody byly 93 - 100%, RSD 3.3 - 4.4%. Výtěžnosti extrakce tergitolu (výchozí koncentrace 0.6 Ķg/ml) na magnetickém PFO z 500 ml reálných vzorků vody byly 87 - 95%, RSD 1.3 - 9.5%.

Získané výsledky naznačují, že magnetické adsorbenty mohou být dobrou alternativou ke standardním postupům.

[1] Šafaříková, M., Šafařík, I.: J. Magn. Magn. Mater. 194, 107-111 (1999).
[2] Šafaříková, M., Kibriková, I., Ptáčková, L., Hubka, T., Komárek, K., Šafařík, I.: J. Magn. Magn. Mater. 293, 377-381 (2005).

5Po58

PURIFICATION AND SOME NEW KINETIC PARAMETERS OF FERB ENZYME FROM PARACOCCUS DENITRIFICANS

Vojtěch Sedláček, Igor Kučera and Oldřich Janiczek

Department of Biochemistry, Faculty of Science, Masaryk University, Kotlářská 2, 611 37 Brno, The Czech Republic, e-mail: 21931@mail.muni.cz

Previously, an enzyme named FerB was purified from *Paracoccus denitrificans* and provisionally characterised as NAD(P)H:Fe(III)chelate, quinone and chromate oxidoreductase [1]. Quinones are significant environmental pollutants that cause oxidative stress due to forming radical intermediates during redox cycling between quinone and hydroquinone states. A possibility exists that FerB might play a protective role analogous to that suggested for the enzyme DT-diaphorase in mammalian systems.

The affinity and velocity of reduction of a series of quinones and naphthoquinones differing in their lipophilicity and electrochemical potential and the effect of some known inhibitors of DT-diaphorase were examined kinetically from the rate of NADH oxidation measured at 340 nm. For the investigated quinone substrates, there were no significant differences in their affinities to the enzyme, but the maximal velocities had methyl and chloro derivatives of benzoquinone according to their redox potential in range from -0.10 to +0.25 V. Cibacron blue and dicumarol were found to be simple competitive inhibitors with NADH for FerB. The stechiometry of electron transfer was monitored by cytochrome c reduction at 550 nm and oxygen consumption by a Clark electrode. This analysis suggested one electron reduction mechanism, which produce ROS, which is contrary to the DT-diaphorase. The results of the inhibitory studies enabled a development of a new effective purification procedure for FerB.

A Cibacron Blue Agarose chromatography in low pressure performance was included as first step, followed by anion exchange chromatography and preparative chromatofocusing in pH range 6-4. High purity and yields of the native enzyme seem to be good reasons for using this approach instead of classical NiNTA separation for subsequent cloning and expression of *ferB* gene in *E. coli.*

This work was supported by a grant FRVŠ 1743/2005 and MSM 0021622413 from the Ministry of Education of the Czech Republic.

[1] Mazoch, J., Tesařík, R., Kučera, I., Turánek, J., Sedláček, V.: Eur. J. Biochem. 271, 553-562 (2004)

5Po59

VYUŽITIE ORGANO-MINERÁLNYCH KOMPLEXOV PRI BIOREMEDÁCII KONTAMINOVANÝCH PÔD

Z. Sejáková, K. Dercová, G. Barančíková*, Z. Čechová

Katedra biochemickej technológie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovensko, e-mail: sejakova@centrum.sk
**Výskumný ústav pôdoznalectva a ochrany pôdy, Reimanova 1, 08 001 Prešov, Slovensko*

Práca je súčasťou projektu „Využitie sorpčných vlastností humínových kyselín pre environmentálne účely“, cieľom ktorého je vyvinutie metódy dekontaminácie a remediácie pôd, založenej na aplikácii organo-minerálneho komplexu (OMK) do pôdy. Ako predstaviteľ organochlórových aromátov bol nami testovaný pentachlórfenol (PCP). Zdrojom jeho prítomnosti v pôdach sú najčastejšie pesticídy. OMK (dodané z VÚPOP Prešov) boli pripravené na VUT Brno na báze lignitových humínových kyselín (organická zložka) a zeolitu (anorganická zložka).

Experimenty sa realizovali v reálnych definovaných vzorkách pôd s prirodzenou mikroflórou (Černozem, Fluvizem a Regozem). Stanovovali sa ich adsorpčno-desorpčné vlastnosti. Desorpcia realizovaná v podmienkach zníženého pH simulovala kyslé dažde, po ktorých by mohlo dojsť k uvoľneniu PCP z OMK. Adsorpcia PCP v pôde s prídavkom OMK bola vyššia ako v pôde s prídavkom zeolitu a v čistej pôde. Desorpcia PCP klesala v opačnom poradí, takže OMK má najlepší adsorpčno-desorpčný pomer a tým aj retenciu. Následne bola študovaná degradácia PCP v čistej pôde a v pôde s prídavkom OMK (pôdny typ Fluvizem, sterilná) inokulovanej bakteriálnym izolátom z kalov ČOV *Comamonas testosteroni* RF2. Zámerom bolo sledovať sorpciu a následne postupné uvoľňovanie PCP pre biodegradáciu. Bolo by to možné využiť pri vyšších počiatočných koncentráciách kontaminantu v pôde, kde by nedochádzalo k biodegradácii v dôsledku toxicity PCP voči mikroorganizmom. Biodegradácia bola po 7 dňoch výrazne nižšia vo vzorkách s prídavkom OMK ako v čistej pôde. Po 17 dňoch degradácia výrazne stúpla v oboch vzorkách. Došlo k postupnému uvoľňovaniu sorbovaného PCP, ale degradácia bola stále nižšia vo vzorkách s prídavkom OMK oproti vzorkám s čistou pôdou. Až po 24 dňoch percento degradácie v pôde s OMK dosiahlo hodnotu degradácie v čistej pôde.

Je možné konštatovať, že OMK sa javí ako vhodný efektívny zachytávač PCP pre potenciálnu aplikáciu v remediačných technológiách na podporu prirodzenej schopnosti pôd eliminovať kontaminanty. Obe jeho zložky sú prírodného pôvodu a nenarúšajú prirodzené pôdne prostredie.

Poďakovanie: Práca bola realizovaná v rámci finančnej podpory grantu VEGA (Grant No.1/1309/04).

5Po60

ORGANICKÉ LÁTKY VZNIKAJÍCÍ SPALOVÁNÍM HALOGENOVANÝCH ORGANICKÝCH LÁTEK

Martin Schmidt, Jan Berka, Josef Kočica

Ústav energetiky, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, e-mail: martin.schmidt@vscht.cz

Odstraňování halogenovaných uhlovodíků se kvůli jejich velké chemické odolnosti (většina z nich je za normálních podmínek nehořlavá) stává ekologickým problémem. V minulosti bylo zkoumáno několik metod likvidace halogenovaných uhlovodíků, například katalytická oxidace, oxidace v nadkritické vodě či odbourávání v plazmě. Tyto metody jsou ale buď drahé, nebo příliš pomalé. Spalování je z ekonomického hlediska relativně úspornou metodou.

Cílem této práce bylo najít takový spalovací režim pro spalování halogenovaných uhlovodíků v plynné fázi se zemním plynem v laboratorním kahanu, při kterém by spaliny obsahovaly minimální množství halogenovaných organických látek, a ověření vhodnosti této metody pro likvidaci halogenovaných uhlovodíků ve spalovnách.

Změny spalovacích podmínek se dosahovalo změnou množství primárního vzduchu vstupujícího do hořáku a různým poměrem spalovaného halogenovaného uhlovodíku k zemnímu plynu. Při každém režimu se stanovily anorganické látky (O_2, CO, CO_2 a NO) a halogenované organické látky ve spalinách, měřila se teplota plamene a počítala se bilance spalování. Na závěr byla odbornou firmou změřena koncentrace dioxinů, polyaromatických uhlovodíků a polychlorovaných bifenylů při spalování tetrachlorethylenu.

Výsledkem této práce bylo nalezení optimálního spalovacího režimu pro každou spalovanou látku a zjištění, že tento režim je pro všechny zkoumané halogenované uhlovodíky téměř stejný a množství halogenovaných látek ve spalinách přímo závisí na poměru látkového množství spalovaného organicky vázaného halogenu k objemu zemního plynu.

5Po61

N-ALKYLPEKTINAMIDY JAKO SORBENTY PRO KYSELINU CHOLOVOU

Sihelníková L., Synytsya A., Čopíková J.

Ústav chemie a technologie sacharidů, VŠCHT Praha, Technická 5, 16628 Praha 6.
e-mail: lucie.sihelnikova@vscht.cz

Sorbenty žlučových kyselin představují polymery sloužící ke snížení hladiny cholesterolu v krevní plasmě. K léčbě hypercholesterolemie se již mnoho let využívá Cholestyraminu® a Colestipolu®, jejichž nízká účinnost se odráží v nutnosti podávání vysokých dávek. Možnou náhradou těchto přípravků by mohly být N-alkylpektinamidy, které jsou předmětem této studie.

N-alkylpektinamidy jsou deriváty pektinu, přírodního polysacharidu, který se nachází v buněčných stěnách vyšších rostlin. *N*-alkylpektinamidy pro tuto studii byly získány heterogenní amino-de-alkoxylací vysokomethylovaného citrusového pektinu (typ XSS, Danisco) s oktyl-, dodecyl- a oktadecylaminem v prostředí *N,N*-dimethylformamidu. Reakce probíhala při teplotě 50 °C a za nepřetržitého míchání. Doba reakce se pro každý z použitých aminů pohybovala v rozmezí od 6 do 72 hodin, čímž byly získány deriváty o různých stupních amidace. Přítomnost alkylamidových substituentů a čistota produktů byly prokázány pomocí FT-IR spekter. Stupeň amidace byl vypočten na základě obsahu dusíku ve vzorku, který byl stanoven metodou dle Kjeldahla.

Adsorpce cholátu sodného, nejběžnější primární žlučové soli ve žluči, byla vyhodnocena na základě změny jeho koncentrace po přidání *N*-alkylpektinamidů. Výchozí roztok byl tvořen 6mM cholátem sodným v 0,1M fosfátovém pufru o pH 6,9. Bylo provedeno srovnání sorpčních schopností jednotlivých derivátů pektinu a vyhodnocena závislost sorpce cholátu sodného na délce alkylového řetězce a stupni amidace.

5Po62

BIOLOGICAL ACTIVITY OF SYNTHETIC PURINE DERIVATIVES - EXAMINATION WITH ALGAL ASSAY

Jolanta Sochacka[a], Alicja Kowalska[b]

[a] *Department of General and Analytical Chemistry,*
[b] *Department of Organic Chemistry, Faculty of Pharmacy, Medical University of Silesia, Jagiellonska St 4, 41-200 Sosnowiec, Poland,*
e-mail: jsochacka@slam.katowice.pl

Algal bioassays might be used to define an activity of different substances to cell metabolism, either stimulatory or toxic, also in a case of substances with anticancer activity [1].

In the presented work, a biological activity of synthesized 2,6-disbstituted-7-methylpurines and 6-mercaptopurine (6-MP, a reference substance) was tested with the green alga *Chlorella vulgaris*. Algal cells were cultivated during one, two or three 24-hr light-dark cycles in a Kühl-Lorenzen liquid medium (in Erlenmeyer flasks; 10-hr light period) and in a solidified medium (on Petri dishes; 14-hr dark period). The tested compounds dissolved in dimethyl sulfoxide (DMSO) were introduced to the culture. The general biological activity of the cells was determined by absorbance at λ=680nm. Growth multiplication factor (GMF) was estimated by the direct counting of the cells in a liquid medium or with a microcolony method. In a latter method, microcolonies containing undivided cells and 2, 4, 8 and 16 aplanospores formed from mother cells were counted in a solid medium.

It was found that the tested compounds exhibited a cytotoxic and antiproliferative activity (in relation to the control culture). After three 24-hr light-dark cycles, a mean value of the determined GMF was 1.94 (in control culture 3.38), the cell mortality varied from 95 to 98 %, and the general biological activity decreased in the range of 72 to 89% in relation to the control culture.

[1] Pruchnik F., Kluczewska G., Wilczok A., Mazurek U., Wilczok T.: *J. Inorg. Biochem., 65*(25), 25 - 34, (1997).

5Po63

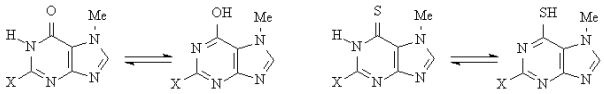
COMPARISON OF LIPOPHILICITY CALCULATED AND DETERMINED BY RP-TLC METHOD OF 2-SUBSTITUTED 6-OXO- AND 6-THIOXO-7-METHYLPURINES

Alicja Kowalska[a], Jolanta Sochacka[b]

[a]*Department of Organic Chemistry,*
[b]*Department of General and Analytical Chemistry, Faculty of Pharmacy, Medical University of Silesia, Jagiellonska St 4, 41-200 Sosnowiec, Poland*
e-mail: jsochacka@slam.katowice.pl

Lipophilicity is an extremely important molecular property that has frequently been used in QSAR studies and in the design of new drugs with the required biological activity.

In continuation of our previous study on the lipophilicity of the purine derivatives [1], series of 2-substituted 6-oxo- and 6-thioxo-7-methylpurines, with a potential cytotoxic or cytostatic activity were obtained. These compounds possessing the carbonyl and thiocarbonyl groups can exist in aqueous solution in two tautomeric forms: in the keto (C=S, C=O) and enol (C-SH , C-OH) forms.



X = Cl, OMe, OEt, OAll, OBz,SMe, SEt, SAll, SBz

In this work, the lipophilicity parameter log P_{TLC} of the purine derivatives was determined by use of the RP TLC (mobile phase pH 7.0) and compared with calculated clog*P* (CS Chem3D 7.0, CambridgeSoft 2001 and http://www.logP.com) for these compounds as neutral and monoanion forms. The dissociation constans, pK_a, was also calculated.

Considerable differences between values of log P_{TLC} at pH 7.0 and clog$P_{neutral}$ but compatibility between log P_{TLC} at pH 7.0 and clogP_{anion} was observed. The dissociation constans, pK_a, was also calculated to give values in the range of 6.62 to 9.80, which shows for more dissociated forms in the solution at pH 7.0. These results suggest necessity of taking the dissociation constans into account in determination of lipophilicity of organic compounds which can exist in aqueous solution in tautomeric forms.

[1] Sochacka J., Kowalska A., *Chem.Listy, 98*, 657 (2004)

5Po64

STANOVENÍ CELKOVÉ AKTIVITY ALFA A BETA METODOU KAPALINOVÉ SCINTILAČNÍ SPEKTROMETRIE

Petra Staffová[1], Mojmír Němec[2, 1], Jan John[2, 1]

[1]*Katedra jaderné chemie FJFI, ČVUT v Praze, Břehová 7, 115 19 Praha 1*
[2]*Centrum radiační chemie a radiochemie, ČVUT v Praze, Břehová 7, 115 19 Praha 1*

Důležitou součástí kontroly vod je podle současné platné legislativy průběžné sledování celkové aktivity alfa a beta. Zjišťování aktivit jednotlivých radionuklidů je náročná a nákladná záležitost, proto byl zaveden tento ukazatel charakterizující obsah radionuklidů s přeměnou alfa resp. beta (kromě radonu) ve vodě. Teprve pokud dojde k překročení povolených limitů ukazatele dochází ke zjišťování konkrétních obsahů jednotlivých radionuklidů.

Nejrozšířenějším způsobem stanovení celkových aktivit radionuklidů ve vodách je spektrometrie záření gama nebo měření proporcionálními počítači. Ovšem tyto metody

měření vykazují řadu nedostatků, kam patří například nemožnost stanovení čistých alfa a beta zářičů, nebo u proporcionálních detektorů 2π geometrie, a většinu těchto měřicích zařízení přitom nelze užít pro detekci alfa a beta záření ve stejném režimu nastavení.

Cílem této práce bylo nalézt vhodnou metodu pro stanovení celkové aktivity alfa a beta, ve které by nedostatky dosud užívaných detekčních metod byly potlačeny nebo zcela odstraněny. Mezi současně používané a dále vyvíjené detekční metody patří i kapalinová scintilační spektrometrie (LSC), která umožňuje stanovovat aktivity alfa i beta zářičů současně a navíc ve 4π geometrii měření. Z tohoto důvodu byl jako měřicí přístroj pro stanovení celkové aktivity alfa a beta použit kapalinový scintilační spektrometr Triathler™ firmy Hidex Oy (Turku, Finsko).

Pomocí vhodně vybraných referenčních radionuklidů bylo nejprve nutné provést optimalizaci přístroje, kam patří nastavení diskriminačních mezí měřících oken, stanovení míry přeslechů - tedy vzájemný průnik spekter. Dále bylo nutné posuzovat vliv solnosti na výtěžek a samotný poměr vzorku a scintilačního koktejlu.

Přípravu vzorků bylo nutné přizpůsobit typu měřených vod, především jde o zkoncentrování na 1/10 původního objemu se současným přidáním rozpouštědel. Vzorek je pak měřen po dobu nutnou pro dosažení požadované nejmenší významné aktivity. Tato hodnota se odvíjí nejen od typu vod, ale i povolených detekčních limitů.

Vypracovaná metodika pak dovoluje vypočíst celkovou objemovou aktivitu alfa a beta a tyto hodnoty lze vztáhnout k jednotlivým typům požadovaných limitů.

5Po65

PEVNÉ EXTRAHENTY NA BÁZE MALONAMIDOV, DIGLYKOLAMIDOV A PYRIDÍNOV PRE SEPARÁCIU LANTANOIDOV A AKTINOIDOV Z VYSOKOAKTÍVNYCH KVAPALNÝCH ODPADOV

J. Šuľaková, F. Šebesta, J. John

ČVUT v Praze, Centrum pro radiochemii a radiační chemii a katedra jaderné chemie, Břehová 7, 115 19 Praha 6, e-mil: sulakova@fjfi.cvut.cz

Prevádzka jadrových reaktorov je sprevádzaná významným negatívnym javom - tvorbou vyhoreného jadrového paliva (VJP). Bezpečné ukladanie VJP je komplikované najmä dlhodobou rádioaktivitou niektorých jeho zložiek. Jednou alternatívou eliminácie vplyvu dlhodobých produktov štiepenia je prepracovanie VJP a následné odseparovanie a jaderná transmutácia dlhodobých rádionuklidov, najmä zo skupiny aktinoidov.

Pre separáciu vybraných rádionuklidov sú v poslednej dobe široko študované pevné extrahenty (PEXy) vyvinuté na katedre jadrovej chémie ČVUT v Prahe v ktorých sú kvapalné lebo pevné extrakčné činidlá zabudované v pojivej matrici modifikovaného polyakrylonitrilu. Cieľom tejto práce bolo podrobnejšie štúdium sorpčných vlastností troch typov pevných extrahentov s aktívnymi zložkami zo skupiny malonamidov, diglykolamidov a bipyridínov.

Boli prevedené experimenty zamerané na stanovenie hmotnostných rozdeľovacích koeficientov D_g vybraných radionuklidov zo skupiny lantanoidov a aktinoidov, ďalej bola študovaná kinetika ich záchytu a kapacita PEXov. Bolo preukázané, že vlastnosti PEXov v kyslom prostredí korelujú s popísanými extrakčnými vlastnosťami samotných extrakčných činidiel. Najvyššie hodnoty D_g boli namerané pre PEXy na báze N,N,N',N'-tetraoctyldiglykolamidu, pre súčasnú separáciu lantanoidov a minoritných aktinoidov sú perspektívne aj PEXy s aktívnou zložkou na báze malonamidov. PEXy na báze bipyridínov sú veľmi perspektívne pre vzájomnú separáciu lantanoidov a minoritných aktinoidov- v prvých experimentoch boli dosiahnuté separačné faktory $SF_{Am/Eu} > 100$ aj v prostredí 3M HNO_3.

5Po66

ANTIRADICAL ACTIVITY AND POLYPHENOLIC ANTIOXIDANTS IN GRAPES (*VITIS VINIFERA L.*) IN THE CZECH WINE-GROWING AREA

Šulc M., Pivec V., Lachman J., Orsák M.

Czech University of Agriculture in Prague, Faculty of Agrobiology, Food and Natural Resources, 165 21 Prague 6 - Suchdol, Czech Republic, e-mail: sulc@af.czu.cz

Contents of polyphenolic antioxidants as total polyphenols (TP), free *trans*-resveratrol (R) and their antiradical activity (ARA) in grape skins and seeds of vine varieties and TP in grape musts originated from 5 wine-growing Czech areas (Most, Veleke Zernoseky, Melnik, Roudnice nad Labem, Kutna Hora) from the harvest 2003 were determined. TP content was determined spectrophotometrically with phenol Folin-Ciocalteauīs reagent, R content by HPLC method, and ARA employing the 1,1-diphenyl-2-picrylhydrazyl stable free radical (DPPH**.**) determined spectrophotometrically. Obtained results were evaluated statistically by Statistica programme. TP did not show statistically significant differences among analysed varieties ($p < 0.05$) in grape seeds and skins, but regarding wine-growing regions a significant difference in TP ($p < 0.10$) in grape skins was found. ARA ($p<0.05$) was not significant both, for grape seeds as well as grape skins in relation to wine-growing regions and varieties. The highest TP contents were found in grape seeds (536.6 μg/g DM), whereas R contents were higher in the skins (av. 1,67 mg/g DM). Blue vine varieties have shown higher TP content in grape skins and also in must as compared with white vine varieties. Assessment of ARA of extracts of model constituents of grapes tannin (T) and gallic acid (GA) revealed their higher antiradical activity in comparison with ascorbic acid (AA).

It was clearly demonstrated that TP contents differed significantly among wine-growing areas at the level of significance $p < 0.05$. From total number of 25 grape samples it was not possible to determine *trans*-resveratrol in must and its content in the seeds and grape skins was also low. The highest R content was found in the grape skins (av. $166.818.10^{-5}$ mg/g DM) and it was 85 times higher in

comparison with seeds (av. $1.969.10^{-5}$ mg/g DM). The average TP content was the highest in seeds (536.6 mg/g DM) and decreased in order skins (165.9 mg/g DM) and must (273.1 mg/L). Seeds contained 3.2 times more TP as compared with grape skins. All average TP contents were higher in blue varieties (282.7 mg/g DM in grape skins, 546.3 mg/g DM in seeds and 326.7 mg/L must), when compared with white varieties (149.6 mg/g DM in skins, 531.2 mg/g DM in seeds and 242.9 mg/L must). Blue vine varieties have 1.89 times higher TP content in grape skins and 1.35 times higher in must as compared with white vine varieties. Statistically significant differences were found among varieties ($p < 0.05$). ARA expressed in AA equivalents was higher in the grape skins of white vine varieties (0.271 AA mg/mL) in comparison with blue varieties (0.271 AA mg/mL), while in the seeds the results were reciprocal (1.032 AA mg/mL in blue varieties and 0.841 AA mg/mL in white varieties) suggesting only lesser contribution of anthocyanins to antioxidant activity. Assessment of ARA of extracts of model constituents of grapes tannin (T) and gallic acid (GA) revealed their higher antiradical activity in comparison with ascorbic acid (AA).

This study was supported with Research Project of Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic MSM 604607090

5Po67

ZMĚNY VLASTNOSTÍ FERMENTOVANÉHO TĚSTA PŘÍDAVKY MLÉČNÝCH PRODUKTŮ

Ivan Švec, Marie Hrušková, Marie Krpálková, Ondřej Jirsa

Ústav chemie a technologie sacharidů, VŠCHT Praha, Technická 6, 166 28 Praha 6,
e-mails: Ivan.Svec@vscht.cz, Marie.Hruskova@vscht.cz

Vlastnosti pšeničného těsta závisejí na vlastnostech mouky, recepturních složkách a podmínkách přípravy těsta [1, 2]. Pro hodnocení technologické kvality mouky se nejčastěji používá fermentované těsto plné receptury a zjištěné reologické charakteristiky popisují chování těsta během jednotlivých technologických fází. Mléčné produkty ovlivňují zpracovatelnost těsta [3] a zvyšují nutriční hodnotu výrobků.

V práci byl vyhodnocen vliv vybraných mléčných produktů na chování fermentovaného těsta z pšeničných mouk označených M1, M2 a M3 ze sklizní 2003 a 2004. Sledované mléčné produkty byly sušená syrovátka, sušená mléka s 5 a 14 % tuku a mléčné náhrady *Lactafitin* (firma *Senzo*-CZ) označené N1, N2. Náhrady se lišily tukovou složkou - N1 obsahovala mléčný a N2 palmojádrový tuk. Přídavky mléčných komponent i náhrad byly 1, 2 a 3 % na mouku. Analytické vlastnosti mouk byly stanoveny pomocí přístroje Inframatic 8600, laboratorně pak byly zjištěny hodnoty Zelenyho testu a čísla poklesu. Reologické zkoušky zahrnuly měření na Fermentografu (SJA, Švédsko), Maturografu a OTG (Brabender, SRN). Byl také proveden pekařský pokus pro přímé hodnocení vlivů mléčných produktů na kvalitu finálního výrobku. Všechna reologická hodnocení a pekařský pokus byly nejprve provedeny podle standardní receptury (bez přídavku mléčných produktů) a následně byl prověřen vliv jednotlivých mléčných produktů a mouk M1, M2, M3.

Mouka M3 měla nižší obsah bílkovin (11,0 %) než M1 a M2 (obě 12,8 %), ale jejich kvalita posouzená Zelenyho testem byla nejvyšší pro mouku M2 (44 ml proti 38 a 37 ml pro M1, resp. M3). Hodnoty čísel poklesu byly pro všechny tři mouky vyšší než optimální hodnota 250 s, v průměru 367 s. Měrné objemy pečiva z těchto mouk při použití standardní receptury byly srovnatelné - 328, 325 a 329 ml/100 g v pořadí M1, M2 a M3.

Zrání těsta popsané objemem kvasných plynů a konečným objemem těsta nebylo v rámci chyby měření ovlivněno jednotlivými mléčnými produkty ani různými koncentracemi. Také nebyl jednoznačně prokázán vliv různé jakosti mouky. Průkazné rozdíly byly naměřeny během kynutí těsta, kdy nejvyšší maturografický odpor vykázala těsta z mouky M1. Jednoznačně kladný vliv na odpor těsta byl zjištěn pro N2, zvláště v kombinaci s moukou M3. Pružnost těst byla pro všechna těsta srovnatelná, v průměru dosáhla 225 BJ. Nárůst objemu při zapékání na OTG měl nejširší interval hodnot, od 15 do 215 BJ.

Výsledky pekařského pokusu svědčí o příznivém vlivu N2, resp. její tukové složky - palmojádrového tuku - na měrný objem pečiva a penetraci střídy. Pečivo s touto náhradou dosáhlo průměrného objemu 315 ml/100g a penetrace 14 mm; pečivo s ostatními mléčnými komponentami mělo v průměru měrný objem i penetraci nižší (290 ml/100g a 10,7 mm).

[1] Gujral H. S., Singh N. (1999): Effect of Additives on Dough Development, Gaseous Release and Bread Making Properties. Food Res. Inter., 32: 691-697.
[2] Krpálková M. (2005): Diplomová práce VŠCHT Praha.
[3] Kenny S., Wehrle K., Stanton C., Arendt E. K. (2000): Incorporation of Diary Ingredients into Wheat Bread: Effects on Dough Rheology and Bread Quality. Europ. Food Res. Technol., 210: 391-396.

5Po68

KAPALINOVÁ CHROMATOGRAFIE AMINOKYSELIN

Soňa Řezková (Táborská), Josef Královský, Martin Adam, David Kahoun, Tomáš Bajer

Univerzita Pardubice, FChT KAlCh, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice,
e-mail: sona.taborska@upce.cz

Včelí med je komplexní produkt mnoha složek. Aminokyseliny, přestože jsou v medu přítomny v nízkých koncentracích (<0,5 %), tvoří důležitou skupinu látek. Jedním z hlavních cílů současného výzkumu ve včelařství je nalezení spolehlivých ukazatelů ke zjišťování rostlinného původu medu. Pro precizní diagnózu původu medu slouží určité specifické chemické znaky, mezi něž můžeme zařadit i obsah některých aminokyselin.

Harmonizované metody Evropské komise pro med aplikují ke stanovení obsahu prolinu spektrofotometrickou metodu založenou na měření intenzity jeho barevného komplexu s ninhydrinem při vlnové délce 510nm. Vzhledem k poměrně dlouhému času analýzy (více jak 60 minut), k malé reprodukovatelnosti absorpčního koeficientu a k možné interferenci ostatních aminokyselin evidentně v medu přítomných, byla studována možnost využití vysokoúčinné kapalinové chromatografie ke stanovení prolinu a ostatních aminokyselin v medu.

V rámci této práce byly studovány možnosti stanovení aminokyselin metodou RP- HPLC s předkolonovou derivatizací. Použitým derivatizačním činidlem byl dansyl chlorid (5-dimethylamino-naftalen-1-sulfonyl chlorid). Optimalizace metody zahrnovala volbu vhodných podmínek derivatizace (vliv teploty, času, světla a pH na přípravu derivátu) a chromatografických podmínek (mobilní fáze, stacionární fáze, průtok, λ_{ex} a λ_{em}).

Metodou HPLC na reverzních fázích s předkolonovou derivatizací byly naměřeny obsahy jednotlivých aminokyselin ve včelím medu. Hodnoty obsahu prolinu byly porovnány s obsahy naměřenými spektrofotometrickou metodou.

Práce byla provedena díky podpoře grantových projektů: projekt MŠM 0021627502 a projekt GAČR 203/05/2106

5Po69

OVERENIE VHODNOSTI APLIKÁCIE MLETEJ HOREČNATEJ HORNINY ZÍSKANEJ PRI VÝROBE MAGNEZITU

Ján Tomáš[1], Daniel Bajčan[1], Peter Lazor[1], Klaudia Pariláková[2], Jaroslav Noskovič[3], Peter Kováčik[4]

[1]Katedra chémie, Fakulta biotechnológie a potravinárstva, Slovenská poľnohospodárska univerzita, Tr. A. Hlinku 2, 949 76 Nitra, e-mail: tomas.toth@uniag.sk
[2]Katedra krajinného plánovania a pozemkových úprav, Fakulta záhradníctva a krajinného inžinierstva, SPU, Tr. A. Hlinku 2, 949 01 Nitra,
[3]Katedra environmentalistiky a zoológie, Fakulta agrobiológie a potravinových zdrojov, SPU, Tr. A. Hlinku 2, 949 01 Nitra,
[4]Katedra agrochémie a výživy rastlín, Fakulta agrobiológie a potravinových zdrojov, SPU, Tr. A. Hlinku 2, 949 01 Nitra

Deficiencia horčíka v pôde sa stáva limitujúcim faktorom tvorby úrod a ich kvality, ktorý blokuje produktívne využívanie ostatných živín. Premieta sa ďalej do produkčného i zdravotného stavu úžitkových zvierat a cez nedostatok horčíka v potravinách, či už rastlinného alebo živočíšneho pôvodu do zdravotného stavu obyvateľstva [1].

Nedostatok horčíka sa prejavuje predovšetkým na kyslých pôdach regozemi a kambizemí [2]. Dosahovanie harmonického pomeru katiónov v pôde nie je možne dosiahnuť jednorázovo, ale v rámci dlhšieho časového horizontu hnojivami s obsahom horčíka na báze uhličitanov ako prírodných foriem horčíka. Platí to pre dolomitické vápence, dolomity, či magnezity, ktoré sú charakteristické s najvyšším obsahom horčíka [3].

Aplikáciou mletej horečnatej horniny v poľných podmienkach na stredne ťažkej pôde typu kambizem, kyslej reakcie sa zistil pozitívny vplyv vo všetkých variantoch. Najvyššie úrody sa dosiahli aplikáciou mletej horečnatej horniny v kombinácii so síranom amónnym. Negatívne na úrode kukurice silážnej sa prejavilo horečnaté hnojivo kieserit, keď úroda bola nižšia ako u kontrolného variantu.

Podobný účinok bol dosiahnutý v poľných podmienkach i na ľahkej pôde typu regozem. Dosiahnuté výsledky potvrdzujú známe poznatky o nevhodnodsti kieseritu na kyslých pôdach a nezastupiteľnosti úpravy pôdnej reakcie pri aplikácii síranových foriem horčíka. V poľných pokusoch sa aplikácia mletej horečnatej horniny ako i kieseritu pozitívne prejavila na obsahu horčíka v zrne kukurice ako i nadzemnej hmote kukurice silážnej.

Táto práca vznikla s podporou agentúry VEGA číslo 1/2428/05.

[1] Balík J, Tlustoš P.: Hnojení horčíkem. In. Horčík a jeho význam v zemědelství. ČZU Praha, s. 68 - 83, 1995
[2] Fecenko J., Ložek O.: Výživa a hnojenie poľných plodín. Nitra, 442s. 2000 ISBN 807137-777-5
[3] Vaněk V.: Význam hořčíku pro zdraví rostlín. Rostlonolékař, 7, s.20 - 21, 1996

5Po70

RIZIKOVÉ PRVKY V PÔDACH A PLODINÁCH ŠTIAVNICKÉHO REGIÓNU

Tomáš Tóth[1], Ján Tomáš[1], Peter Lazor[1], Juraj Chlpík[2], Klaudia Jomová[3], Alžbeta Hegedüsová[3]

[1]Katedra chémie, Fakulta biotechnológie a potravinárstva, Slovenská poľnohospodárska univerzita, Tr. A. Hlinku 2, 949 76 Nitra, e-mail: tomas.toth@uniag.sk
[2]Katedra pedológie a geológie, Fakulta agrobiológie a potravinových zdrojov, SPU, Tr. A. Hlinku 2, 949 01 Nitra,
[3]Katedra chémie, Fakulta prírodných vied, Univerzita Konštantína Filozofa, Tr. A. Hlinku 1, 949 01 Nitra

Problematika pôdnej hygieny v náväznosti na obsahy ťažkých kovov v pôde ako aj ich následného vstupu do rastlín je v dnešnej dobe aktuálna [1]. V práci sme sledovali obsah vybraných ťažkých kovov na pôdach v povodí rieky Štiavnica. V tejto lokalite výrazne ovplyvňuje stav životného prostredia, ako aj stav pôdnej hygieny antropogénna kontaminácia vplyvom banskej činnosti, ako aj geochemické anomálie, charakteristické pre tento región, čo predpokladá zvýšený obsah ťažkých kovov v pôde aj v rastlinách [2].

Obsahy sledovaných ťažkých kovov (Pb, Cd, Zn a Cu) v záujmovej lokalite sme posudzovali z hľadiska rizík, ktoré vyplývajú z ich prieniku do potravového reťazca, čo môže mať vplyv na zdravotnú nezávadnosť potravín. Obsah ťažkých kovov v pôde sme stanovili podľa metodiky pre monitoring pôd. Sledovali sme ich celkové obsahy a obsahy v 2M HNO_3. Pôdne vzorky sme odoberali na dvanástich

vybraných lokalitách. Rastlinný materiál sme odobrali z tých istých lokalít, odkiaľ sme odobrali aj pôdne vzorky.

Z dosiahnutých výsledkov možno konštatovať, že hodnotenie a sledovanie pôdnej hygieny v tomto regióne dôležité. Obsahy niektorých sledovaných prvkov prekračujú legislatívou stanovené limitné hodnoty, čo z tohto pohľadu radí tieto pôdy medzi pôdy rizikové, kontaminácia je analyticky preukazná. Rizikovosť týchto pôd sa odzrkadľuje aj na kvalite dopestovaných produktov, či už z pohľadu potravinárskej hodnoty, ako aj ich hygienickej nezávadnosti. Vzhľadom na ohrozenosť pôd v tomto regióne je potrebné sa stavu pôdnej hygieny venovať aj naďalej.

Táto práca bola riešená v rámci projektu VEGA č. 1/2428/05 - Hodnotenie hygienického stavu pôdy a minimalizácia vstupu rizikových látok do produktov využívaných v potravinárskom priemysle a poľnohospodárskej prvovýrobe Bansko-Štiavnického a Hontianskeho regiónu

[1] Ducsay, L., Varga, L., Drahoš, L.: Tvorba nadzemnej fytomasy kukurice siatej po aplikácii stúpajúcich dávok rizikových prvkov. In: Výživa rostlin v trvale udržatelném zemědelství. Brno, MZLU 2003, s. 246 - 250. ISBN 80-7157-664-6.

[2] Lahučký, L. et al.: Effect of chromium on plant production ability. Agriculture (Poľnohospodárstvo), Volume 51, 2005 (5), p. 274 - 280, ISSN 0551-3677.

5Po71

VYUŽITÍ CHEMOMETRIE PŘI SLEDOVÁNÍ KVALITY KAKAOVÉHO PRÁŠKU

Anežka Trilčová[a], Jana Čopíková[a], Manuel António Coimbra[b], Miloslav Suchánek[c], Hana Křístková[a], Andriy Synytsya[a]

[a]*Ústav chemie a technologie sacharidů, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, ČR*
[b]*Departamento de Química, Universidade de Aveiro, Campus Universitário de Santiago, 3810-193 Aveiro, Portugal,*
[c]*Ústav analytické chemie, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, ČR*

V potravinářském průmyslu jsou velmi oblíbené výrobky z kakaových bobů. Jsou to např. čokoláda, čokoládové cukrovinky, trvanlivé pečivo, kakaový prášek, mléčné nápoje a různé cukrovinky vyráběné z kakaového prášku aj. Produkty z kakaového prášku jsou snad nejvíce konzumovány dětmi, a proto by měly podléhat důkladné kontrole.

Soubor 100 vzorků kakaového prášku byl analyzován spektrálními metodami (blízká a střední infračervená oblast) doplněnými o analytické stanovení obsahu tuku, obsahu dusíku a vlhkosti. Získaná data byla vyhodnocena multivariační analýzou.

Tato práce byla naměřena v rámci projektu MSM 6046137305

5Po72

SORPCE CHLOROVANÝCH ORGANICKÝCH SLOUČENIN NA NEIONOGENNÍCH SORBENTECH A FOTOKATALYTICKÁ OXIDACE REGENERAČNÍHO ČINIDLA

Aleš Trpišovský, Luděk Jelínek, Zdeněk Matějka, Michal Kolář*, Josef Krýsa*

Ústav Energetiky, FTOP, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6
**Ústav Anorganické Technologie, FCHT, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6*
e-mail: trpisova@vscht.cz

Chlorované organické látky patří mezi perzistentní znečisťující látky. Mnohé z nich jsou prokázané karcinogeny, nebo látky podezřelé z karcinogenity. V této práci je popsána kombinace procesů sorpce chlorovaných látek na neionogenních sorbentech a jejich fotokatalytické destrukce. Chlorované organické látky jsou neionogenními sorbenty efektivně a selektivně odstraněny z vody, přičemž anorganické látky sorbovány nejsou. Fotokatalytická destrukce vyžaduje vysokou koncentraci organické látky a nepřítomnost anorganických solí. Tyto podmínky splňuje právě použitý regenerační roztok, který obsahuje vysoké koncentrace chlorovaných látek v organickém rozpouštedle.

Sorpce byly prováděny pomocí dynamických kolonových pokusů z roztoků obsahujících 10 mg/l chlorované organické látky (4-chlorfenol, 1,2-dichlorethan a 3-(p-chlorfenyl)-1,1-dimethylmočovina [herbicid monuron]). Byly použity 2 typy sorbentů aromatické a alifatické povahy - Amberlite XAD-4 (styren DVB typ) a Amberlite XAD-7 (akrylátový typ). Pro desorpci chlorovaných organických látek byla testována různá rozpouštědla. Koncentrace 4-chlorfenolu a monuronu byly měřeny pomocí UV-VIS a HPLC, koncentrace 1,2-dichlorethanu pomocí GC-MS.

Všechny uvedené organické látky nejlépe sorboval Amberlite XAD-4. Jeho užitkové kapacity rostly v tomto pořadí 1,2-dichlorethan (25 mmol/l) < 4-chlorfenol (60 mmol/l) < monuron (115 mmol/l). Při zvýšení pH z 6 na 8.3 došlo k malému poklesu (~ 10%) užitkové kapacity. Rychlost fotokatalytické destrukce výrazně klesá v prostředí methanolu, ne však v prostředí acetonitrilu. Pro tento kombinovaný proces se acetonitril zatím jeví jako nejvhodnější rozpouštědlo pro regeneraci sorbentu.

Tato práce vznikla za podpory VZ MŠMT ČR MSM 604 613 7304.

5Po73

BIELKOVINOVÉ DETERMINANTY CELIAKÁLNEHO OCHORENIA

Zdenka Gálová, Ján Hoblík, Dana Urminská, Ivan Michalík, Jiří Petr*

Katedra biochémie a biotechnológie FBP SPU , Trieda A. Hlinku 2, 949 76 Nitra,
**Katedra rostlinné výroby FAPPZ ČZU, Kamýcka 129, 165 21 Praha 6*

Celiakia je ochorenie spôsobené zvýšenou citlivosťou niektorých jedincov ľudskej populácie na prítomnosť prolamínových bielkovín. Zastúpenie bielkovinových frakcií albumínov a globulínov v láskavci, quinoi a pohánke bolo 50-65%, v ciroku zrnovom 20,5%, v ciroku cukrovom 7,8 %, v prose, béri vlašskom a rosičke krvavej 12-13%. Zastúpenie prolamínov bolo v ciroku cukrovom vyššie ako v ciroku zrnovom, v prose bol obsah prolamínov 3-6 %, v rosičke krvavej 23,1 % a v béri vlašskom 38,7 %.

Z výsledkov SDS-PAGE vyplýva, že zastúpenie vysokomolekulárnych glutenínových podjednotiek je v ciroku 5,57 %, v prose 5,5 % a v béri vlašskom 3,10%, v rosičke krvavej 19,4 % a v quinoi 10,37%. Uvedená bielkovinová frakcia nebola vôbec detegovaná v láskavci. Analýzou v A-PAGE boli detegované nízkomolekulárne glutenínové podjednotky a monomérne gliadíny. Vo vzorkách láskavca bol ich podiel v rozsahu 48,6-65,3%, v ciroku 26,1-53,7 %, v quinoi a rosičke krvavej 40,8%, v prose 42,4 % a v béri vlašskom 63,2-71,6%.

Metódou ELISA sa zistilo, že okrem prolamínových bielkovín pšenice, raži, jačmeňa a čiastočne ovsa, vykazovali pozitívnu reakciu aj synteticky pripravené tetrapeptidy (Pro-Ser-Gln-Gln, Pro-Gln-Gln-Gln, Ser-Gln-Gln-Gln, Pro-Lys-Gln-Gln).

Na prípravu bezlepkovej diéty možno odporučiť: quinoa, cirok zrnový, cirok cukrový, pohánka, láskavec, rosička krvavá, proso, bér vlašský a niektoré odrody ovsa.

Táto práca bola podporovaná štátnym programom výskumu a vývoja „Potraviny - kvalita a bezpečnosť“ číslo 2003SP 270280E010280E01.

5Po74

ZVÝŠENIE VÝŽIVNEJ KVALITY ZRNÍN ENZYMATICKOU TRANSFORMÁCIOU

Dana Urminská, Eva Sendrejová, Ivan Michalík

Katedra biochémie a biotechnológie FBP SPU , Trieda A. Hlinku 2, 949 76 Nitra

Najdôležitejšie zdroje rastlinných bielkovín v potrave sú zrniny, bielkoviny ktorých sú však výživovo neplnohodnotné, pretože majú nedostatočný obsah esenciálnych aminokyselín, nízkou rozpustnosťou a hydrolyzovateľnosťou enzýmami tráviaceho traktu. Jedným z možných spôsobov zvýšenia využiteľnosti bielkovín je aplikácia proteolytických enzýmov.

Ako substráty pre hydrolýzu boli použité bielkovinové frakcie zrna pšenice a živočíšne bielkoviny hovädzí sérový albumín a ovoalbumín. Reakčná zmes obsahovala 0,1% a 1% substráty, ktoré sa hydrolyzovali 0.5% a 1% enzýmami Trypsín, Subtilizín A, Subtilizín BPN’ a enzým „Nitrazým“[1], pri teplote 37°C 15 - 360 minút. Hydrolytická účinnosť bola stanovená formolovou titráciou a pre stanovenie molekulových hmotností produktov bola použitá SDS-PAGE [3].

Najvýraznejšou účinnosťou sa vyznačuje proteáza Trypsín, najmenej efektívnym bol Subtilizín BPNī. Proteáza "Nitrazým" svojou aktivitou zodpovedá proteáze Subtilizín A. Najvhodnejším substrátom je hovädzí sérový albumín, najmenej hydrolyzovaným sú prolamínové bielkoviny. Optimálny čas hydrolýzy bol 30 - 60 minút. Molekulová hmotnosť hydrolyzátov pripravených Trypsínom je 24-28 kDa a 45- 66kDa. Produkt po pôsobení „Nitrazýmu“ obsahoval najmä peptidy s hmotnosťou 14 kDa - 27 kDa. Pôsobením Subtilizínu BPN’ sa získali aj nízkomolekulárne peptidy s hmotnosťou 5 - 6 kDa a produkty hydrolýzy Subtilizínom A tvoria zmes peptidov s hmotnosťou do 28 kDa a menšie zastúpenie peptidov s hmotnosťou nad 45 kDa.

Táto práca bola podporovaná štátnym programom výskumu a vývoja „Potraviny - kvalita a bezpečnosť“ číslo 2003SP 270280E010280E01.

[1] Michalík Ivan, Szabová Eva, Poláková Anežka, Urminská Dana: *Biologia, 50/3,* p.249-252 (1995).
[2] Wrigley, C. W.: In: Linskens, H. F. - Jackson, J. F.: *Seed analysis*. Berlin, Heidelberg : Springer-Verlag, p. 17-41 (1992)

5Po75

TĚKAVÉ LÁTKY SUŠENÉHO SMRŽE ŠPIČATÉHO (MORCHELLA CONICA)

*Pudil F., *Uvíra R., **Janda V.

**Ústav chemie a analýzy potravin, Fakulta potravinářske a biochemické technologie VŠCHT Praha,*
***Ústav technologie vody a prostředí,*
e-mail: pudilf@vscht.cz

Metodou GC-MS s dávkováním technikou SPME byly analyzovány těkavé látky sušených plodnic smrže špičatého (*Morchella conica*) z tržní sítě.

V sušeném vzorku byl jako hlavní těkavá složka identifikován dimethylpyrazin. Dále bylo v menším množství detegováno dalších šest substituovaných pyrazinů. Druhou nejvýše koncentrovanou složkou byl 1-hexanol. Z kyslíkatých derivátů byly nalezeny též 2-nonanal, nonanal, 1-nonanol, dekanal a benzenethanol. Ve vzorku se vyskytovalo též několik blíže neurčených terpenických složek, monoterpenické a sesquiterpenické uhlovodíky. Bylo detegováno i několik látek, které se do vzorku dostaly jako kontaminanty životního prostředí.

K charakteristickým senzorickým vlastnostem sušených smržů pravděpodobně významně přispívají pyrazinové deriváty a karbonylové alifatické deriváty.

5Po76

JEČMENNÝ HYDROLYZÁT NOVÉ GENERACE PRO VÝROBU PIVA

Petr Brynych, Tomáš Zoufalý

Výzkumný ústav pivovarský a sladařský, a.s., Lípová 15, 120 44 Praha 2, Česká republika,
e-mail: brynych@beerresearch.cz

Výzkumný ústav pivovarský a sladařský, a.s., a Výzkumný ústav potravinářský Praha, vyvinuli ječmenný hydrolyzát určený především pro použití k surogaci v českém pivovarství. Surogáty jsou, jak známo, veškeré náhražky, které mohou do určitého množství z jakýchkoliv příčin nahradit základní pivovarskou surovinu, kterou je ječný slad. Důvody používání surogátů jsou převážně ekonomické, ovšem při jejich optimální aplikaci mohou přispět, a také přispívají, k zlepšení některých kvalitativních vlastností piva. Na základě zkušeností, a také některých zahraničních požadavků, autoři diskutují vliv běžné surogace na charakter piva i vliv extrémní surogace na kvalitativní parametry piva, resp. nápojů na bázi piva.

V současné době roste zájem pivovarů o používání cukerných sirupů - hydrolyzátů, vyráběných převážně enzymatickou hydrolýzou. S tím souvisí rostoucí požadavky na kvalitativní parametry hydrolyzátů, popř. jejich koncentrátů, hlavně z hlediska zastoupení požadovaných mono- a oligo-sacharidů. Z hlediska zemědělské politiky jde o žádoucí jev, kdy může dojít k lepšímu a většímu zužitkování produkce obilovin.

Oproti běžně dostupným cukerným sirupům, kde výrazně převládá glukosa, autoři řízením enzymatické hydrolýzy optimalizovali poměr maltosy a glukosy, který je v hydrolyzátu obdobný jako v běžné sladině. Z důvodu využití převážně v pivovarství byla pozornost při řízení hydrolýz věnována obsahu alfa-aminodusíku v hydrolyzátu.

Při vědecké rozpravě autoři předložili k degustaci 2 pivní nápoje. Nápoj P1 měl 51 % sladu nahrazeno hydrolyzátem, u nápoje P2 bylo 76 % sladu nahrazeno hydrolyzátem. Přítomní, mezi kterými byli i zástupci Pivovaru Sapporo, hodnotili nápoje velmi kladně jako lehké světlé pivo. Některé použité výsledky byly získány v rámci řešení projektu č. QF3297 MZe ČR.

5Po77

SELEKTIVNÍ SORPCE OXOANIONTŮ KOVŮ POMOCÍ CHEMICKY MODIFIKOVANÉ HNĚDÉ MOŘSKÉ ŘASY Ascophyllum nodosum

Eva Mištová, Helena Parschová, Luděk Jelínek, Zdeněk Matějka, Milan Beneš[a], Ferdinand Šebesta[b]

Ústav Energetiky, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, ČR;
aÚstav makromolekulární chemie AV ČR, Heyrovského nám.2,162 06 Praha 6, ČR; bFJFI, ČVUT Praha, ČR
e-mail: mistovae@vscht.cz

Biosorbenty jsou v současné době používané jako alternativní materiály pro odstraňování iontů těžkých kovů. Existuje široká a pestrá škála materiálů, které se v oblasti odstraňování iontů kovů používají např. schránky korýšů, plísně, houby a bakterie. Složení hnědé mořské řasy *Ascophyllum nodosum* (kyselina alginová, celulosa, manitol, chitosan aj.) je určitým předpokladem pro použití k odstraňování oxoaniontů kovů z vodných roztoků [1,2].

Cílem práce bylo experimentálně zjistit možnost opakovaného použití sorbentů na bázi hnědé mořské řasy pro sorpci oaxoaniontů kovů Mo, V, W, Ge a proměřit podmínky sorpce pro jednotlivé oxoanionty.

Po provedení několika různých chemických úprav (estrifikace, amidace aj.) byly získány mechanicky a chemicky stalé sorbenty, které bylo možné, i přes některá omezení, používat opakovaně pro dynamické kolonové experimenty.

Bylo zjištěno, že sorpce oxoaniontů Mo, V, W je možná při nižších vstupních koncetracích kovu (do 1 mg/l), nízkém pH vstupního roztoku a při kondicionaci sorbentu kyselinou před sorpcí. Sorpce oxoaniontu germania úspěšná nebyla.

V porovnání s průmyslově vyráběnými sorbenty [3] mají tyto biosorbenty výrazně nižší užitkové kapacity a také jejich životnost je omezená, výhodou by mohla být jejich nižší cena.

Tato práce vznikla za podpory Výzkumných záměrů MŠMT České Republiky MSM 6046137304.

[1] Mikan A., Bartušek M.: *Coll.C.Chem.Commun., 45*, 2642 - 2655, (1980)
[2] Bartušek M., Šustáček V.: *Coll.C.Chem.Commun., 48* , 2785 - 2796, (1983)
[3] Matějka Z., Parschová H., Jelínek L., Mištová E., Ruszová P., Šebesta F.: *J. Ion. Exch., 14,* 237 - 240, (2003)

5Po78

VARIABILITA SLOŽENÍ SACHARIDŮ V HLÍZÁCH JAKONU (*SMALLANTHUS SONCHIFOLIUS*)

Kateřina Valentová[a], Pavel Kosina[a], Vladimír Křen[b], Jitka Ulrichová[a], Vilím Šimánek[a]

[a] Ústav lékařské chemie a biochemie LF UP, Hněvotínská 3, CZ-775 15 Olomouc
[b] Laboratoř biotransformací, Mikrobiologický ústav AV ČR, Vídeňská 1083, CZ-142 20 Praha-4

Jakon (*Smallanthus sonchifolius, Asteraceae*) je rostlina blízce příbuzná topinamburu (*Helianthus tuberousus*), pocházející z Jižní Ameriky, kde je pěstována jako zemědělská plodina pro chutné podzemní hlízy. Koncem minulého století se jakon začal pěstovat v západní Evropě, Japonsku a na Novém Zélandu. Jakon lze pěstovat s dobrými výnosy také v České republice [1]. Hlízy jakonu obsahují $\beta(2\rightarrow1)$oligofruktany inulinového typu a jsou v čerstvém nebo sušeném stavu vhodné pro potravinářské využití. $\beta(2\rightarrow1)$Oligofruktany působí v GIT, kde příznivě ovlivňují střevní mikroflóru. Dále zlepšují funkci jater a ledvin, mají příznivý vliv na metabolismus sacharidů a lipidů, zlepšují vstřebávání minerálů a ovlivňují imunitní systém [2].

Cílem práce bylo analyzovat složení sacharidů v hlízách

jakonu různých genotypů. Spektrum mono, di- a oligosacharidů v hlízách bylo závislé na klimatických podmínkách během kultivace, na genotypu jakonu a také na době a způsobu skladování. V průběhu skladování docházelo k statisticky významnému nárůstu koncentrace glukosy a fruktosy (z 1,0 na 26,2 % za 1 měsíc při 4 °C), zatímco obsah oligofruktanů se proporcionálně snižoval. Pokud byly hlízy ihned po sklizni usušeny, složení sacharidů zůstalo zachováno minimálně 2 roky po sklizni (6,9 % monosacharidů). Sušené hlízy jakonu v kombinaci se silymarinem jsou součástí doplňku stravy určeného pro ochranu jater a trávicího traktu.

Práce byla podpořena výzkumným záměrem MSM 6198959216.

[1] Valentová K., Ulrichová J.: Biomed. Pap. Med. Fac. Univ. Palacky Olomouc Czech Repub., 147, 119-130 (2003).
[2] Modrianský M., Valentová K., Přikrylová V., Walterová D.: Chem. Listy, 97, 540-547 (2003).

5Po79

MÔŽE BYŤ ANTIOXIDANT TOXICKÝ?

Andrea Vargová[1], Ondrej Hegedűs[3], Alžbeta Hegedűsová[2]

[1]Kat. ekológie a environmentalistiky, FPV UKF v Nitre, Tr. A. Hlinku 1, 94974 Nitra,
e-mail: andrea.vargova@post.sk
[2]Katedra chémie, FPV UKF v Nitre, Tr. A. Hlinku 1, 94974 Nitra, ahegedusova@ukf.sk
[3]Výskumný ústav zeleninársky, Andovská 6, Nové Zámky

Hladina selénu v ľudskom organizme je závislá od jeho koncentrácie v požívatinách. S nízkym obsahom selénu vo výžive priamo súvisí výskyt mnohých nádorových a kardiovaskulárnych ochorení. Cieľom práce bolo sledovať možnosť zvýšenia obsahu selénu, najmä organicky viazaného, v zrne hrachu záhradného cestou fortifikácie pôd anorganickými zlúčeninami selénu. Na zabezpečenie vytýčeného cieľa boli vo VÚZ v Nových Zámkoch založené modelové pokusy. Zvýšený obsah selénu sa dosiahol prídavkom roztoku selenanu sodného, resp. seleničitanu sodného do upraveného pôdneho substrátu v definovaných dávkach. Selén sa stanovoval po mineralizácii rastlinného materiálu vzoriek metódou HG-AAS. Celkový obsah selénu sa stanovoval priamo v mineralizáte vzoriek a organicky viazaný selén, v proteínoch po ich predchádzajúcej izolácii a následnej mineralizácii. Podrobná metóda stanovenia bola opísaná autormi [1, 2].

V modelových pokusoch sledovania transferu Se z fortifikovanej pôdy do rastlinných častí sa zistilo, že najvyššia aplikovaná koncentrácia selenanu sodného výrazne brzdí rast hrachu záhradného. Kvôli objasneniu pôvodu a príčin oneskoreného rastu sa založili laboratórne pokusy klíčenia sledovanej zeleniny. Klíčenie prebiehalo v prostredí selenanu sodného a seleničitanu sodného s rovnakou koncentráciou, ako v modelových pokusoch. Výsledky sledovania naznačujú, že fytotoxicita aplikovaných solí sa neprejaví v štádiu klíčenia, ale až v štádiu rastu, keď rastlina sa mení na autotrofný systém.

Príspevok je vypracovaný ako podklad k Štátnej úlohe VaV „Potraviny-kvalita a bezpečnosť“ 2003SP270280E010280E01.

[1] Vargová A., Hegedűs O., Hegedűsová A.: In: Zborník z VI. vedeckej konferencie doktorandov a mladých vedeckých pracovníkov, 132-135 (2004)
[2] Hegedűsová A., Hegedűs O., Jomová K., Vargová A.: Chem. listy 8, 530 (2004)

5Po80

EPIFLUORESCENČNÍ METODA PRO SLEDOVÁNÍ ÚČINNOSTI FOTOKATALYTICKÉ DEKONTAMINACE

Mária Veselá, Michal Veselý, Blanka Kremláčková

Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Purkyňova 118, 612 00 Brno,
e-mail: vesela@fch.vutbr.cz

Pokud je oxid titaničitý ozářen zářením s energií větší než je jeho šířka zakázaného pásu, dochází k excitaci elektronů do vodivostního pásu a ve valenčním pásu vzniká kladně nabitá díra. Po separaci nábojů, pokud nedojde k jejich rekombinaci, následuje jejich migrace na povrch polovodičové částečky, dochází k reakci s adsorbovanými molekulami a vznikají velmi reaktivní hydroxylové radikály, superoxidové radikály a peroxid vodíku. Pokud se k takovém povrchu přiblíží buňka mikroorganismu, dochází k ataku buněčné membrány fotogenerovanými radikály, což vede k degradačním procesům a následné smrti buněk. Velmi tenké, transparentní vrstvy oxidu titaničitého mohou být aplikovány na povrchy různých materiálů, přicházejících do styku s mikroorganismy a po ozáření mohou být takové povrchy dekontaminovány.

Při studiu tohoto procesu je potřebné rozlišovat živé a mrtvé buňky a sledovat jejich počet. Byly použity kvasinky *Hansenula anomala, Candida tropicalis, Zygosaccharomyces rouxii* a *Saccharomyces cerevisiae*. V tomto případě tradiční metody určení počtu buněk není možné použít. Proto byla použita mikroskopická metoda rozlišení živých a mrtvých buněk akridinovou oranží jako fluorescenční sondou a metoda přímého počítání buněk na povrchu oxidu titaničitého. Při pH 5,7-8,0 živé buňky fluoreskují zeleně (530 nm) a mrtvé buňky fluoreskují červeně (640 nm). Digitální kamerou byl nasnímán velký počet obrazů v epifluorescenčním mikroskopu. Rozlišení mrtvých a živých buněk a určení jejich počtu bylo následně provedeno pomocí Lucia softwaru a byly statisticky zpracované. Při fotokatalytických experimentech na tenké vrstvě oxidu titaničitého se zjistilo, že v krátkém čase docházelo k usmrcení studovaných buněk.

5Po81

SPÔSOBY ÚPRAVY VZORIEK STRUKOVÍN PRE STANOVENIE OBSAHU VYBRANÝCH FLAVONOIDOV METÓDOU HPLC

Alena Vollmannová[a], Ján Tomáš[a], Tomáš Tóth[a], Mária Timoracká[a], Bronislava Škarbová[b]

[a]Katedra chémie FBP SPU, Tr. A. Hlinku 2, 949 76 Nitra, SR, e-mail: Alena.Vollmannova@uniag.sk
[b]ŠVPÚ, Akademická 3, 949 01 Nitra, SR, e-mail: skarbova@svunitra.sk

Flavonoidy sa v posledných rokoch dostávajú do popredia záujmu ako odbornej, tak i laickej verejnosti najmä z dôvodu hľadania faktorov, ktoré sú nositeľmi zdravotne prospešných účinkov ovocia, zeleniny, cereálií [1] a strukovín [2]. Mnohí autori ich zaraďujú medzi chemoprotektívne prírodne látky [3].

Cieľom práce bolo overiť metodické postupy úpravy vzorky pre stanovenie štyroch vybraných flavonoidov (daidzeín, genisteín, kemferol a apigenín) v dvoch rôznych genotypoch fazule, hrachu a sóje metódou HPLC s UV DAD detekciou.

Vzorky boli spracované 2 postupmi. Prvým bola extrakcia do organického rozpúšťadla a následná lyofilizácia, pričom boli odskúšané 4 varianty doextrahovania v acetóne (70%) pred samotnou lyofilizáciou vzorky. Druhým postupom bola kyslá hydrolýza s použitím HCl (c =1 mol.dm^{-3}).

Prvý spôsob sa ukázal ako málo efektívny, pretože v niektorých prípadoch boli obsahy flavonoidov dokonca pod hranicou detekovateľnosti a v hydrolyzovaných vzorkách sóje boli asi 10-násobne vyššie než v lyofilizovaných vzorkách..

Stanovené obsahy daidzeínu (412 - 2 mg.kg^{-1}) a genisteínu (632 - 10 mg.kg^{-1}) klesali v poradí sója > hrach > fazuľa, zatiaľ čo obsahy kemferolu (49 - 6 mg.kg^{-1}) a apigenínu (44 - 8 mg.kg^{-1}) v poradí hrach > fazuľa > sója.

Pravidelná konzumácia strukovín teda môže byť jedným zo spôsobov zvýšenej prevencie cievnych, nádorových a neurodegeneratívnych ochorení.

Táto práca bola podporovaná štátnym programom výskumu a vývoja „Potraviny - kvalita a bezpečnosť“ číslo 2003SP270280E010280E01.

[1] Petr, J., Michalík, I., Tlaskalová, H., Capouchová, I., Faměra, O., Urminská, D., Tučková, L., Knoblochová, H.: Czech Journal of Food Science, 21, (2), s. 59-70, (2003)
[2] Jomová, K., Vollmannová, A., Hegedüsová, A., Morovič, M.: Chem. Listy, 98, s. 708, (2004)
[3] Moravcová, J., Kleinová, T.: Chem. Listy, 96, s. 282-289, (2002)

5Po82

POROVNANIE ÚČINNOSTI NIEKTORÝCH PRÍRODNÝCH ANTIOXIDANTOV

Lucia Zahradníková, Štefan Schmidt, Stanislav Sekretár

Katedra potravinárskej technológie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU, 812 37 Bratislava, e-mail: lucia.zahradnikova@stuba.sk

Skúmanie nových typov antioxidantov je stále aktuálnou témou vedy a výskumu. Práve rastliny by mali byť alternatívou v použití, pretože okrem stabilizačného účinku na požívatiny sú aj bohatým zdrojom bioaktívnych látok a biodegradovateľné na netoxické produkty.

Bola skúmaná antioxidačná aktivita týchto rastlín - *Ginkgo biloba*, *Cinnamomum zeylanicum* (škoricovník cejlonský), *Oenothera biennis* (pupalka dvojročná), *Salvia officinalis* (šalvia lekárska), *Rosemarinus officinalis* (rozmarín lekársky). Ich stabilizačný účinok bol skúmaný metódami zrýchlenej oxidácie na prístrojoch Rancimat a Oxidograph, pridaním ich extraktov do jedlých olejov. Testované extrakty vykázali antioxidačnú aktivitu a sú účinné na stabilizáciu jedlých olejov. Najlepší stabilizačný účinok na oleje mali extrakty zo šalvie a z rozmarínu.

Táto práca vznikla s podporou VEGA projektu 1/2392/05.

[1] Ellain Wojtaszek, M., Krucynski, Z., Kasprzak, J.: Variations in free radical scavening activity of Gingko biloba leaves in the period of complete development of green leaves to fall of yellow ones. In: Food Chemistry, 79, 2002, s.79-84
[2] Byeoung - Soo, P., Sung - Eun, L.: Antioxidative activity of Gingko biloba leaves - derived components on free radicals and active oxygen species. In: Food Science and Biotechnology, 9, 2000, s.317-321
[3] van Beek, T. A.: Chemical analysis of Gingko biloba leaves and extracts. In: Journal of Chromatography A, 967, 2002, s.21-55

5Po83

OXIDACE BIOLOGICKY A ENVIRONMENTÁLNĚ VÝZNAMNÝCH SLOUČENIN S KATALYZÁTORY NA BÁZI NANOČÁSTIC S PORFYRINOVÝM SKELETEM - STUDIUM SELEKTIVITY

Pavel Zachař, Vladimír Král, Vojtěch Albert Borek, Liběna Kodýmová

Vysoká škola chemicko technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6, e-mail: Pavel.Zachar@vscht.cz

Oxygenační působení enzymu cytochrom P 450 je jedním z rozšířených pochodů v živých organismech a příprava katalyzátorů vycházejících z jeho struktury a modelování selektivní katalytické aktivity těchto sloučenin je jednou z významných oblastí supramolekulární chemie.

Byla syntetizována řada sloučenin, kde základní porfyri-

nový skelet byl modifikován různými substituenty, především pentafluorofenylem a jako centrální kovový ion byl použit kromě Fe(III) také Mn(III), Mn(II), Co(III), Co(II) a Zn(II). Imobilizace metaloporfyrinů byla provedena několika způsoby. Jako nosič, na kterém byly tyto sloučeniny zakotveny byl použit aminopropylsilikagel a aminomethyl substituované Merrifiledovy pryskyřice (funkcionalizovaný kopolymer styren-divinylbenzen).

Takto připravené katalyzátory byly použity pro studium oxidačních reakcí steroidních sloučenin a vybraných triazinových herbicidů. Byla sledována selektivní účinnost jednotlivých katalyzátorů a kinetika probíhajících reakcí. Reakční směsi byly analyzovány metodou GC MS. V případě studovaného cholesta-5-en-3-ol acetátu docházelo k oxygenaci výhradně v poloze 7 (vznik příslušného ketonu), u Atrazinu nastávala především dechlorace.

Jak v případě cholesterolacetátu, tak v případě Atrazinu, byly shledány výrazné rozdíly v aktivitě jednotlivých katalyzátorů. Aktivními se ukázaly katalyzátory s centrálním kovem Mn(III), Mn(II) a Co(II), zatímco katalyzátory s Co(III), Fe(III) a Zn(II) byly buď podstatně méně aktivní nebo zcela neaktivní, a to jak v krátkodobém působení, tak po delší době. U nejaktivnějšího katalyzátoru - Mn(III) - byla konverze výchozího substrátu již v prvním dni 70%, zatímco u neaktivního katalyzátoru (Zn) byla i po 11 dnech konverze nižší než 10%.

V následující etapě práce budeme studovat reakce dalších steroidních sloučenin, což by mělo přispět k lepšímu poznání mechanismu působení katalyzátorů. Studium účinků na triazinové herbicidy by mělo přispět k poznání způsobu odbourávání těchto látek pomocí ligninolytických hub, kde působení cytochromu P 450 je jedním z důležitých mechanismů jejich degradace.

Tato práce byla realizována za podpory výzkumného záměru MSM6046137307 a grantu AVČR s kódem IAA6020411

5Po84

SPECIACE ORGANORTUŤNATÝCH SLOUČENIN V RYBÍ MATRICI METODOU GC/MS, POSOUZENÍ DERIVATIZAČNÍCH A EXTRAKČNÍCH POSTUPŮ

Lukáš Kohl, Pavel Zachař

Vysoká škola chemicko-technologická v Praze,
Technická 5, 166 28 Praha 6,
e-mail: Pavel.Zachar@vscht.cz

Speciační analýza organokovových sloučenin je důležitou oblastí environmentální analytiky, a to zejména pro organortuťnaté sloučeniny, které patří mezi vysoce toxické chemické látky, přičemž mezi toxicitou jednotlivých sloučenin jsou významné rozdíly. Speciační analýza vyžaduje spojení vhodné separační techniky s citlivým detekčním systémem (především GC/MS, GC/ICP/MS, HPLC/MS), čemuž předchází vhodný způsob extrakce z matrice (spojený s uvolněním vazeb sloučenin vázaných na biologický materiál), prekoncentrace a derivatizace. Po uvolnění specií z matrice methanolickým louhem (nebo MeOH/HCl) patří mezi nejčastěji používané způsoby izolace specií z matrice extrakce nepolárním rozpouštědlem nebo technika mikroextrakce tuhou fází (SPME). Vedle derivatizace iontových forem rtuťnatých a organortuťnatých sloučenin Grignardovým činidlem v bezvodém prostředí je zejména v poslední době často užívána alkylace tetraalkylboráty. Ačkoli je publikována řada modifikací uváděných postupů, nejedná se o zcela rutinní techniky a všechny tyto metodiky mají stále ještě určitá úskalí.

V předložené práci byly studovány některé způsoby extrakce (hexan, SPME), použití různých derivatizačních činidel (tetraethyl-, tetrapropyl- a tetrafenylborát) a volba vhodného vlákna pro SPME (PDMS 100µm, PDMS 7µm a kombinovaný sorbent PDMS/DVB). Extrahované organortuťnaté sloučeniny byly separovány plynově-chromatograficky a detekovány hmotnostní spektrometrií. Pozornost byla věnována zjištěnému nežádoucímu rozkladu některých organortuťnatých sloučenin v nástřiku plynového chromatografu. Výhody alternativních způsobů analýzy byly porovnány a jednotlivé kroky zvoleného analytického postupu byly optimalizovány.

5Po85

SCREENING FOR ACETYLCHOLINESTERASE INHIBITORS OF MICROALGAE ORIGIN

Petr Zelík[a], Jiří Kopecký[b], Alena Lukešová[c]

[a]*Institute of Food Chemistry and Biotechnology, Faculty of Chemistry, University of Technology, Purkyňova 118, 612 00 Brno, Czech Republic, e-mail: zelik@fch.vutbr.cz,*
[b]*Department of Autotrophic Microorganisms, Institute of Microbiology, Academy of Sciences of the Czech Republic, Opatovický mlýn, 379 01 Třeboň, Czech Republic, e-mail: kopecky@alga.cz,*
[c]*Department of Soil Microbiology and Soil Chemistry, Institute of Soil Biology, Academy of Sciences of the Czech Republic, Na sádkách 7, 370 05 České Budějovice, Czech Republic, e-mail: luksa@upb.cas.cz*

More than 200 species of algae and cyanobacteria were screened in quest to find potential producers of new acetylcholinesterase (AChE) inhibitors among autotrophic microorganisms. The dichloromethane extracts of culture mediums, methanolic and methanolic-tetrahydrofuran biomass extracts were tested for AChE inhibitory activity using spectrophotometric Ellman's method optimized for microplate assay.

There was found out AChE inhibitory activity higher than 90 % in biomass extracts of *Monodus subteratus, Nostoc sliz. kol. (SV-mol, ISB 93, tok Soj, 5/97, DE)* and *Nostoc ellipsosporum (2, GM, Štěbal)*. Extract from the biomass of *Nostoc clipsespor* proved 85 % AChE inhibitory activity. *Geminella terricola* and *Monodopsis subterranea* biomass extracts proved inhibitory activity of 50 - 60 %. AChE inhibitory activities of the remainder biomass extracts and dichloromethane medium extracts showed lower than 50 %. The crude extracts of active strains were analyzed using HPLC-MSn.

There were determined fractions with anti-AChE activity in the crude extracts of the most active strains *Nostoc sliz. kol. (SV-mol, ISB 93, tok Soj, 5/97, DE)* and and *Nostoc ellipsosporum (2, GM, Štěbal)*. AChE inhibitor from the strain *Nostoc sliz.* kol. was isolated and subsequently type of inhibition was determined.

6Po01

DVOUFÁZOVÁ HYDROLÝSA HOVĚZÍCH CHLUPŮ

Pavel Mokrejš, Ferdinand Langmaier, Milan Mládek, Karel Kolomazník

Universita T. Bati ve Zlíně, Fakulta technologická,
Ústav technologie bílkovin a kůže,
nám. T. G. M. 275, 762 72 Zlín, Republika česká,
mokrejs@ft.utb.cz

Hovězí chlupy jsou keratinovým odpadem vznikajícím v průběhu zpracování kůží hovězího dobytka (z mechanického odchlupování či odpadních louhárenských vod) na usně. Hlavní složkou chlupů (srsti) je bílkovina keratin, který, v důsledku velkého množství disulfidických vazeb, je nerozpustný ve většině běžných rozpouštědlech a je odolný vůči proteolytickým enzymům [1]. Chlupy jsou velmi cenným koželužským odpadem, vhodným mj. na přípravu hydrolysátů. Lukrativní využití keratinových hydrolysátů spočívá především v přípravě obalových materiálů a filmů [2] či k výrobě materiálů sloužících k uchování a následnému postupnému uvolňování substance s širokou možností aplikací, např. k regulovanému uvolňování hnojiv, čistících a desinfekčních prostředků apod. Příspěvek je zaměřen na zužitkování keratinového odpadu 2-fázovým hydrolytickým rozkladem. Po přípravných operacích (promytí a odtučnění) byly hovězí chlupy v 1. fázi podrobeny předzpracování ve vodném roztoku 2-merkaptoethanolu a po odfiltrování a promytí vodou byly následně ve 2. fázi podrobeny enzymovému rozkladu (komerční proteinása) ve vodném prostředí. Experimenty probíhaly za definovaných podmínek (teplota, pH, míchání směsi) dvouúrovňovými faktorovými pokusy se třemi sledovanými experimentálními proměnnými (množství redukčního činidla, množství enzymu na navážku chlupů a doba enzymového rozkladu) se dvěma centrálními experimenty. Poté byla směs promyta vodou a zfiltrována. Bylo sledováno procento nerozpuštěného zbytku chlupů (gravimetricky). Výsledky experimentů byly statisticky vyhodnoceny.

Autoři děkují MŠMT Č.R. za finanční podporu při realisaci výzkumného projektu formou MSM grantu č. 7088352102.

[1] Schrooyen, P. Feather Keratins:*Modification and Film Formation*. Febodruk BV, Enschede, 1997. ISBN 90 36513 02 2.
[2 Yamauchi, *K. et al. J. of Biomed. Mat. Res., 31*, 439-444, (1996).

6Po02

MECHANISMUS A KINETIKA ADSORPCE ANORGANICKÝCH FOREM AS NA SORBENTECH NA BÁZI Fe

Alexandr Martaus, Barbora Doušová

Ústav chemie pevných látek, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6 - Dejvice, Česká republika, martausa@vscht.cz

Arsen se svými vlastnostmi řadí k důležitým kontaminantům ohrožujícím životní prostředí. Proto se současný výzkum zabývá jak charakterizací arsenu v jednotlivých složkách prostředí, tak možnými způsoby efektivní dekontaminace znečistěných oblastí, jako jsou např. území postižená těžbou a úpravou rud.

Sloučeniny arsenu, zejména jeho anorganické formy, jsou pro většinu biotopů škodlivé, a z hlediska toxicity jsou zařazeny mezi látky trvale nebezpečné. Toxické látky mohou být zachyceny a akumulovány především v půdním profilu, ze kterého jsou následně uvolňovány do biochemických cyklů.

Půdní horizonty i kontaminované důlní vody obsahují kromě arsenu také oxidy a hydroxidy železa, hliníku a manganu, ke kterým má arsen jako metaloid vysokou afinitu (Lin, Wu, 2003).

Měření a experimentální práce budou probíhat ve dvou krocích. Nejprve budou studovány modelové vzorky vod, sorpčních médií a půd odpovídající přirozeným systémům, ve druhé fázi se bude jednat o reálné vzorky kontaminovaných půdních horizontů a vod z lokalit postižených těžbou rud na území ČR.

Dosud realizované experimentální práce se zaměřili na srážení modelového roztoku s vysokým obsahem Fe a As^{III} nebo As^{V} „in situ“. Ke srážení se použily sodné alkálie (NaOH a Na_2CO_3). Byl sledován mechanismus vzniku jednotlivých oxidů-hydroxidů Fe a následné adsorpce AsO_3^{3-}, resp. AsO_4^{3-} na tyto fáze. Ty byly analyzovány pomocí RTG fázové analýzy a Ramanovy spektroskopie.

[1] Lin, Z. & Puls, R.W. (2003): Potential indicators for the assessment of arsenic natural attenuation in the subsurface. - Advances in Environmental Research 7, 825-834.

6Po03

STANOVENÍ TLOUŠŤKY OBALU U PELET METODOU BLÍZKÉ INFRAČERVENÉ SPEKTROSKOPIE (NIR)

J. Muselík [1], K. Krejčová [1], M. Steklá [1], L. Vorlová [2], S. Marton [3], M. Rabišková [1]

[1] Ústav technologie léků, Farmaceutická fakulta VFU, 612 42 Brno
[2] Ústav hygieny a technologie mléka, Fakulta veterinární hygieny a ekologie VFU, 612 42 Brno
[3] Pharmaceutical Institute, Semmelweis University of Medicine, H-1092 Budapest

Lékové mikroformy, zejména pelety a obalené pelety, se hojně používají při konstrukci násobných lékových forem s řízeným uvolňováním léčiva. Nejvýznamnější terapeutické výhody těchto lékových forem zahrnují zjednodušení dávkovacího režimu, snížení fluktuace hladiny léčiva v krvi, minimalizování projevů vedlejších nežádoucích účinků, lepší biodostupnost a lépe předvídatelné uvolňování obsaženého léčiva. Metodou blízké infračervené spektroskopie (NIR) lze stanovit tloušťky vrstvy filmu [1] nebo tloušťky plastového obalu [2] a proto je potenciálně vhodná pro vývoj metody použitelné ve farmaceutické technologii při kontrole tloušťky obalu u pelet. NIR je fyzikální, nedestruktivní metoda, vyžadující minimální nebo žádnou přípravu vzorku a její přesnost může být vysoká. Pásy v NIR spektrech se překrývají, proto je pro vytvoření kalibračního modelu nutné použití chemometrických metod, nejčastěji metody PLS (Partial Least Squares).

Pro vytvoření kalibračního modelu byla použita spektra pelet, u nichž byla stanovena tloušťka obalu pomocí optického mikroskopu. Pelety o průměru 0,5-0,8 mm s obsahem léčiva (sodná sůl diklofenaku) a pomocných látek (Avicel PH 101 a monohydrát laktosy) se obalily různým množstvím vodné disperze ethylcelulosy Surelease® E-7-19010. Vzorky použité pro kalibraci měly tloušťku obalu 10-60 μm. Kalibrační model byl vytvořen pomocí PLS algoritmu.

Pro stanovení tloušťky obalu byl zjištěn korelační koeficient r = 0,9998 a směrodatná odchylka kalibrace RMSEC = 0,294 a počet PLS faktorů 5.

[1] Andersson M., Josefson M., Langkilde F.W., Wahlund K.-G.: *J. Pharmaceut. Biomed. Anal., 20*, 27-37, (1999).
[2] Laasonen M., Harmia-Pulkkinen T., Simard C., Räsänen M., Vuorela H.: *Eur. J. Pharm. Sci.*, 21, 493-500, (2004).

6Po04

TERMODYNAMICKÉ ASPEKTY TECHNOLOGIE 1,4-DIAZABICYKLO[2,2,2]OKTANU A VÝBĚR VHODNÝCH SUROVIN

Jiří Trejbal, Miroslav Petrisko, Josef Pašek

Ústav organické technologie, Fakulta chemické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6
Jiri.Trejbal@vscht.cz

VŠCHT Praha ve spolupráci s BC-MCHZ vyvíjí postup přípravy 1,4-diazabicyklo[2,2,2]oktanu (DABCO), který je založen na kysele katalyzovaných cyklizacích vhodných látek v plynné fázi na zeolitu struktury ZSM-5. Jestliže vyjdeme z ethylendiaminu (EDA) je syntéza DABCO sledem čtyř reakcí, kdy postupně vznikají diethylentriamin (DETA), piperazin (PIP), aminoethylpiperazin (AEPIP) až DABCO. Reakce jsou rovnovážné, přičemž reakce vzniku PIP a DABCO mají rovnováhu posunutou výrazně ve prospěch produktů, což je důvodem proč jsou v reakční směsi hlavně DABCO a PIP, zatímco DETA a AEPIP jsou nalezeny jen v nízkých koncentracích. První tři reakce jsou

exotermní a poslední, tvorba DABCO, je endotermní, což znamená, že s rostoucí teplotou se rovnováha prvních tří reakcí posouvá k výchozím látkám, rovnováha poslední reakce se posouvá k produktu. To se projevuje změnou poměru DABCO/PIP s teplotou. Pokud si představíme řadu možných výchozích látek počínaje EDA přes DETA, PIP až po AEPIP a uvážíme, kolik vedlejších reakcí může nastat u každé z nich, je teoreticky z hlediska selektivity na DABCO nejhodnější AEPIP, který poskytuje DABCO jedinou reakcí. Překvapivě je však nejvhodnější výchozí látkou EDA, kdy je možno dosáhnou téměř 100% teoretického výtěžku oproti 50% výtěžku u AEPIP. To je způsobeno termodynamickými aspekty a také vysokou tvarovou selektivitou zeolitu ZSM-5.

6Po05

PŘÍPRAVA SFÉRICKÉHO GRANULÁTU HORNÍM POSTŘIKEM V ZAŘÍZENÍ AEROMATIC MP-1

David Vetchý[1], Michaela Novotná[1], Miloslava Rabišková[1], Tomáš Volný[2], Eva Gryczová[1], Adam Häring[1], Michaela Švarcová[1], Tomáš Sýkora[1]

1 Ústav technologie léků, Farmaceutická fakulta, Veterinární a farmaceutická univerzita Brno, Palackého 1-3, 612 42 Brno, vetchy@email.cz
2Inovační institut, Krnovská 11, 746 01 Opava

Farmaceutické granuláty (zrněné prášky) jsou soudržné shluky tuhých částic složených z léčiva a pomocných látek. Základní stavební jednotkou granulátů jsou částice, které mohou být krystalické, amorfní, mikroskopické nebo makroskopické. Granulát slouží jako meziprodukt při výrobě tablet: zlepšuje tokové vlastnosti a lisovatelnost práškovitých směsí, zabezpečuje obsahovou stejnoměrnost léčiv a minimalizuje segregaci částic. Používá se také jako hotová léková forma, tvoří náplň želatinových tobolek a je výchozím poloproduktem pro retardety zásobníkového i matricového typu. Fluidní granulace je jednou z nejčastěji používaných granulačních metod, její výhodou je rychlost a produkce pravidelných aglomerátů.

Cílem experimentální práce bylo připravit metodou fluidní granulace horním postřikem sférický granulát z léčiva L-arginin monohydrochloridu, který by po naplnění do želatinových tobolek svými vhodnými jakostními parametry a estetickými vlastnostmi zvýšil konkurenceschopnost a etablování budoucího produktu na trhu.

V zařízení Aeromatic MP-1 se podařilo optimalizovat podmínky pro výrobu sférického granulátu ze sacharosy o velikosti částic 0,8 mm až 1,25 mm a tyto podmínky se úspěšně aplikovaly při granulaci vlastního léčiva L-argininu monohydrochloridu. Získal se tak produkt s vhodnými fyzikálními vlastnostmi a s požadovanými sférickými částicemi.

6Po06

TEPELNÉ CHARAKTERISTIKY KOLAGENNÍCH HYDROLYSÁTŮ

Pavel Mokrejš, Ferdinand Langmaier, Milan Mládek, Karel Kolomazník

Universita T. Bati ve Zlíně, Fakulta technologická, Ústav technologie bílkovin a kůže,
nám. T. G. M. 275, 762 72 Zlín, Republika česká,
mokrejs@ft.utb.cz

Hydrolysáty z chromočiněných postružin jsou nízkomolekulární produkty získané ve 2. stupni enzymové hydrolysy [1, 2]. Hydrolysáty nacházejí uplatnění při výrobě adhesiv, tensidů či finišových úprav usní [3]. Lukrativnější využití spočívá ve výrobě obalových materiálů. Zpracování na obalové materiály bude nutné realisovat plastikářskými technologiemi, což předpokládá nutnost znalosti tepelných vlastností hydrolysátů. Předmětem předložené práce je studium tepelných vlastností několika výrobních šarží komerčně vyrobených práškových hydrolysátů diferenční scaningovou kalorimetrií (DSC). Měření byla prováděna v hliníkových miskách v dusíkové atmosféře v teplotním intervalu od 20 do 320 oC rychlostí ohřevu dT/dt = 10 oC.min^{-1}. Vyhodnocením grafických záznamů bylo zjištěno, že teplota skelného přechodu (T_g) se pohybovala v rozmezí 142-172 ^oC a teplota tání (T_m) v intervalu 190-238 ^oC (v závislosti na výrobní šarži hydrolysátu), přičemž T_m je u každé výrobní šarže hydrolysátu nejméně o 40 ^oC vyšší, než T_g. Teplotní interval mezi T_g a T_m je dostatečně velký na to, aby hydrolysáty mohly být bezpečně zpracovány. K oxidaci hydrolysátů dochází při teplotách v intervalu 221-263 ^oC a k degradaci při teplotách v úzkém rozmezí 294-300 ^oC. Nicméně, pro zpracování hydrolysátů plastikářskými technologiemi bude nutné tyto modifikovat přídavkem změkčovadel, což bude předmětem dalších studií.

Autoři děkují MŠMT Č.R. za finanční podporu při realisaci výzkumného projektu formou MSM grantu č. 7088352102.

[1] Taylor, M. M. et al. *J. of the Soc. of Leather Techn. and Chem, 81,* 5-13, (1997).
[2] Taylor, *M. M. et al. JALCA, 93*, 61-82, (1998).
[3] Semrlkosmac, V. et al. *Resources Conservation Recycling*, 13, 97-104, (1995).

6Po07

APLIKACE MODELU NEZREAGOVANÉHO JÁDRA K POPISU REAKCE OXIDU ZINEČNATÉHO SE SULFANEM

Pavel Čermák, Vladimír Glaser, Jan Vídenský, Ivona Sedlářová

Ústav anorganické technologie, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, e-mail: Jan.Vidensky@vscht.cz

Provedená kinetická studie se týká problematiky odsiřování tepelných elektráren s paroplynovým cyklem, kde je výhodné zbavovat generátorový plyn od sloučenin síry při vyšších teplotách, například pomocí regenerovatelného oxidu zinečnatého. Všechna experimentální měření byla provedena s úzkou frakcí zrn chemosorbentu na bázi oxidu zinečnatého v izotermním průtočném reaktoru za použití modelové plynné směsi tvořené dusíkem, vodíkem a sulfanem. Z provedených výpočtů koncentračních gradientů sulfanu v ústí pórů vycházejících na povrch zrn chemosorbentu a v zrnu na počátku reakce vyplynul pro proměřované reakční parametry zanedbatelný pokles koncentrace sulfanu směrem do středu zrna. Toto zjištění vedlo k závěru, že všechny krystality oxidu zinečnatého v zrnu reagují za stejných podmínek. Průběh sulfidace chemosorbentu lze pak popsat modelem nezreagovaného jádra pro sulfidaci jednoho krystalitu. K vyhodnocení experimentálních dat byly použity dvě varianty modelu. První předpokládá konstantní velikost krystalitu a druhá zahrnuje jeho zvětšování v důsledku probíhající reakce. S využitím uvedených představ byly odvozeny vztahy umožňující vypočítat průběh reakčních izoterem. Do nich byly použity údaje o rozměru a tvaru krystalitu odhadnuté z fotografií, rychlostní konstanty získané zpracováním reakčních izoterem a zdánlivé hustoty a porozity sulfidu zinečnatého vypočítané na základě modelu tvořeného zvětšujícími se krystality oxidu zinečnatého. Aplikace získaných rovnic pro popis reakčních izoterem ukázala, že průběh sulfidace lépe postihuje druhá modelová představa.

Tato práce vznikla s finanční podporou výzkumného záměru MSM 223100001 a MSM 6046137301.

[1] J. Szekely, J.W. Evans, *Chem. Eng. Science, 25*, 1091-1107, (1970)
[2] V. Glaser, *Aplikovaná reakční kinetika,* skripta VŠCHT Praha, (1989)
[3] L.A. Fenonil, S. Lynn, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 35, 1024-1043, (1996)

6Po08

SIMS INVESTIGATION OF OLED STRUCTURE BASED ON Alq_3

A. Vincze[1], M. Kytka[2], J. Kováč[1,2], J. Jakabovič[2]

[1]International Laser Center, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, Slovakia
[2]Department of Microelectronics, Slovak University of Technology, Faculty of Electronic Engineering and Information Technology, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, Slovakia
vincze@ilc.sk

Organic light emitting diodes (OLEDs) received a great deal of attention in last years due to their potential in new application and flat panel displays. It constituted at least by the emitting layer and injecting contacts (electrodes). Organic material tris-(8-hydroxyquinoline) aluminum (Alq3) is widely used and extensively studied because of its excellent stability and luminescence properties [1]. The efficiency of these EL devices is highly dependent on the injection behaviors of the contacts and quality of the interface. The most common conductive substrate for OLEDs is indium tin oxide (ITO) consisting In_2O_3 and SnO_2 with the rate of 9:1, deposited on glass carriers as a transparent anode. As a cathode material Al is used with low work function [2]. These materials shows high reactivity and it may cause the chemical reactions and interdifusion [3] of contact material to organic layer. In this work OLED samples (ITO/Alq_3/Al) are investigated by employing SIMS analysis for evaluate the interfaces between the processed sample structures consisting of Al contact layer.

The VEGA 1/0152/03 project is acknowledged.

[1] J. Kováč, L. Peternai, M. Kytka, J. Jakabovič, V. Gottschalch, T.C. Wong, WOCSDICE 2004, pp. 91
[2] M. Stößel, J. Staudigel, F. Steuber, J. Blassing, J. Simmerer, A. Winnacker, H. Neuner, D. Metzdorf, H.-H. Johannes, W. Kowalsky, Synthetic Metals, Vol. 111-112, pp. 19-24, 2000
[3] S. T. Lee, Z. Q. Gao, L. S. Hung Applied Physics Letters, Vol. 75, pp. 1404

6Po09

SEPARACE HOŘČÍKU Z CHROMITÉHO KALU VÍCEFÁZOVÝM VYMÝVÁNÍM

Pavel Mokrejš, Karel Kolomazník, Milan Mládek, Ferdinand Langmaier

Universita T. Bati ve Zlíně, Fakulta technologická, Ústav technologie bílkovin a kůže, nám. T. G. M. 275, 762 72 Zlín, Republika česká, mokrejs@ft.utb.cz

Enzymovou hydrolysou chromočiněných odpadů se řeší problém zpracování tuhých odpadů koželužského a

obuvnického průmyslu (postružiny, usňový manipulační odpad). Kromě toho, že tyto odpady obsahují značné množství proteinického materiálu, obsahují také chróm. Doposud se tyto odpady skládkovaly, čímž docházelo jednak k plýtvání proteinickým materiálem a rovněž bylo třeba řešit rizika s možnostmi úniku kontroversních sloučenin chrómu. Konečnými produkty enzymové hydrolysy chromočiněných odpadů jsou proteinický hydrolysát, který nachází stále nové oblasti uplatnění a zbylý chromitý kal, jehož využití je předmětem diskusí [1]. Vzhledem k poměrně vysokému obsahu chrómu se nabízí možnost jeho využití pro výrobu pigmentů [2]. Na druhé straně, požadavky na kvalitu pigmentů jsou takové, že jeho přímá aplikace není možná bez předchozí úpravy. Problematickou otázkou je zejména obsah MgO, který se používá jako promotor při enzymové hydrolyse chromočiněných odpadů. Předložená práce se zabývá možnostmi separace hořčíku z chromitého kalu 3-fázovým vymýváním vodou. Chromitý kal se míchal s čerstvou vodou, přičemž byly vyzkoušeny hmotnostní poměry 1:1 a 1:2 a různé doby vymývání. pH směsi bylo v průběhu vymývání udržováno na konstantní úrovni (5≤0,1) přídavkem 10% roztoku H_2SO_4. Uvedená technologie dosahuje 84% účinnosti separace hořčíku z chromitého kalu, který po této úpravě může být využit jako sekundární surovina při výrobě pigmentů [3].

Autoři děkují MŠMT Č.R. za finanční podporu při realisaci výzkumného projektu formou MSM grantu č. 7088352102.

[1] Cabeza, L. F. et al. *JALCA, 93*, 299-315, (1998).
[2] Berry, F. J. et al. *JALCA, 96,* 46-53, (2001).
[3] Tahiri, S. et al. *JALCA, 96,* 1-8, (2001).

6Po10

ÚPRAVA POVRCHU GaAs PRED PULZNOU LASEROVOU DEPOZÍCIOU

Miroslav Michalka[1], Jaroslava Škriniarová[2], Jaroslav Bruncko[1]

[1]Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, miroslav@ilc.sk
[2]Katedra mikroelektroniky FEI STU Bratislava, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava

Vlastnosti III-V polovodičových prvkov výrazne závisia na kvalite povrchu východiskového substrátu. Procesy čistenia a leptania sú široko využívané pred rastom heteroštruktúr, fotolitografiou, metalizáciou a pod. Hlavným cieľom čistenia povrchu je získať povrch polovodiča, ktorý neobsahuje žiadne kovové nečistoty, žiadne prachové nečistoty a oxidy. V prípade, že povrch nie je pripravený podľa presne definovaných podmienok, môže dochádzať jeho degradácii a tým aj k znehodnoteniu povrchu pre ďalšie použitie. Na druhej strane prítomnosť oxidov zhoršuje charakteristiku ohmických kontaktov. Vysokokvalitný povrch musí spĺňať nasledovné požiadavky:

1. bez prítomnosti prachových, kovových a iných častíc
2. bez prítomnosti oxidov
3. rovný a hladký

Bod 1 sa uskutočňuje pomocou čistenia a mokrého chemického leptania. Bod 2 mokrým chemickým leptaním a tepelným spracovaním substrátu. V našej práci sme sledovali čistenie GaAs substrátu pomocou mokrého chemického leptania a sledovali sme kvalitu povrchu pomocou rastrovacieho elektrónového mikroskopu. Na odstránenie rôznych častíc a zvyškov kovov sme použili nasledovné chemické leptadlá:

1. $HF : H_2O$
2. $NH_4OH : H_2O_2 : H_2O$,
3. $HCl : H_2O_2 : H_2O$,
4. $H_3PO_4 : H_2O_2 : H_2O$,
5. kyselina citrónová : H_2O_2.

Zistili sme, že optimálny proces čistenia GaAs je nasledovný:

- odstránenie oxidov v zmesi $HF : H_2O$,
- odstránenie niekoľkých nanometrov GaAs vrstvy leptacím roztokom $NH_4OH : H_2O_2 : H_2O$,
- vyhladenie povrchu pomocou zmesi $HCl : H_2O_2 : H_2O$.

Takto pripravený povrch bol zbavený všetkých nečistôt a dostatočné hladký. Povrch po konečnej úprave v zmesi $HCl : H_2O_2 : H_2O$ vykazoval veľmi tenkú vrstvu As-oxidu, ktorý sa ľahko odstráni pred depozíciou zahriatím na teplotu 400°C.

Táto práca je podporovaná Vedeckou grantovou agentúrou MŠ SR v rámci projektu VEGA 1/0152/03, a Agentúrou na podporu vedy a techniky v rámci projektu APVT-51-032902.

6Po11

ÚČINOK VEĽMI MALÝCH MNOŽSTIEV POLYETYLÉNOXIDU NA VYBRANÝCH DRUHOCH FORMOVACÍCH ZMESÍ Z VÝROBY

Harold Mäsiar, Nikola Kaloforov

Trenčianska univerzita Alexandra Dubčeka v Trenčíne, Fakulta špeciálnej techniky
Študentská 1, 911 50 Trenčín, e-mail: masiar@tnuni.sk

V tomto príspevku je odskúšaný účinok veľmi malých množstiev polyetylénoxidu (PEO) na technologických vlastnostiach a jeho ovplyvnenie z druhu vybranej formovacej zmesi ako aj z energií zhustenia (9,81 J a 18,62 J). Vykonalo sa to na grafickej závislosti troch technologických vlastností (priedušnosti, väznosti a voľnej tekutosti) od vlhkosti (W). Väznosť bola posudzovaná podľa pevnosti v tlaku a formovateľnosť zmesi - podľa voľnej tekutosti.

PEO sa pridával do formovacej zmesi pomocou vodného roztoku.

Zo všetkých štyroch vybraných druhov formovacích zmesí z výroby najlepšie výsledky na zlepšenie technologických vlastností sa dosahovali pri formovacej zmesi pre automatickú formovaciu linku (AFL). Pri energii zhustenia 18,62 J väznosť je zvýšená a priedušnosť je neaditívne

vysoká. Väznosť je takmer 2 krát zvýšená a priedušnosť zachováva svoju neaditívnu vysokú hodnotu pri energii zhustenia 9,81 J. Okrem toho dobré výsledky sa dosahovali pri modelovej formovacej zmesi.

Vyššie uvedené zvýšenie priedušnosti umožňuje použitie merných tlakov pri strojovom formovaní.

6Po12

VEĽMI MALÉ MNOŽSTVÁ POLYETYLÉNOXIDU S MOLEKULOVOU HMOTNOSŤOU 600 000 MODIFIKÁTOROM NIEKTORÝCH ZÁKLADNÝCH TECHNOLOGICKÝCH VLASTNOSTÍ JADROVÝCH ZMESÍ ZLIEVÁRENSKÝCH NA BÁZE ALKALICKÝCH FENOLOVÝCH ŽIVÍC

Harold Mäsiar, Nikola Kaloforov

Trenčianska univerzita Alexandra Dubčeka v Trenčíne, Fakulta špeciálnej techniky
Študentská 1, 911 50 Trenčín, e-mail: masiar@tnuni.sk

Účinok polyetylénoxidu s molekulovou hmotnosťou 600 000 alebo 200 000 (PEO 600 000 alebo PEO 200 000) dodaného do jadrových zlievárenských zmesí na báze alkalických fenolových živíc vo forme prášku je neaditívne vysoký na priedušnosť. Pritom pôsobenie PEO 600 000 je vyššie v porovnaní s PEO 200 000. Neaditívne vysoký účinok na priedušnosti PEO 600 000 je pri takých malých množstvách ako 0,02 - 0,1 % -hm. a v prípade PEO 200 000 je pri 0,1 % -hm. Neaditívnosť účinku rastie od 0,02 až po 0,1 % -hm. PEO 600 000.

Pevnosť v rozštepe jadrovej zlievárenskej zmesi na báze alkalických fenolových živíc: pri účinku PEO 600 000 pridaného vo forme prášku je zvýšená pri koncentráciách 0,02 - 0,06 % -hm.; z PEO 600 000 pridaného vo forme roztoku je znížená pri 0,04 - 0,1 % -hm.; z PEO 200 000 pridaného vo forme prášku je trošku zvýšená pri 0,02 % -hm. a potom znížená.

Vyššie uvedené experimentálne výsledky poukazujú, že účinok malých množstiev PEO je vyšší pri jeho molekulovej hmotnosti 600 000 a pridávanom vo forme prášku do jadrových zlievárenských zmesí na báze alkalických fenolových živíc.

Ekologický význam získaných experimentálnych výsledkov spočíva v tom, že z malých množstiev PEO v pieskových formách sa získava menej splodín s jeho spaľovaním pri odlievaní. Na rozdiel od väčšiny ďalších polymérov používaných vo formovacích či jadrových zmesiach sú veľmi malé množstvá PEO veľmi málo toxické.

Organizátori a autori

ďakujú

všetkým, ktorí podporili

57. zjazd chemických spoločností a vydanie prvého čísla časopisu ChemZi

Zjazd sa koná pod záštitou primátora mesta Vysoké Tatry
Ing. Jána Mokoša

GENERÁLNI SPONZORI

Slovnaft

ČLEN SKUPINY MOL

Zväz chemického a farmaceutického priemyslu

AUTORSKÝ INDEX

A

Adam M. 5Po01, 5Po04, 5Po15, 5Po68
Adam V. 1Po56
Adamčíková Ľ. 1P01, 1Po35
Adamec J. 3Po110
Addová G. 3PP3, 3Po02, 3Po111
Afonso A.F. 2Po60
Aizpurua J. M. 3Po76
Alberti M. 2Po80, 2Po81
Amar I.A. 1Po83
Ambrová M. 2Po02
Anděl L. 6P03
Andrezálová L. 2Po01
Antošová B. 5Po02, 5Po46
Aqeel S. M. 3P23
Aranyosiová M. 1P23, 1Po47, 1Po58, 1Po75
Augustín J. 5Po03

B

Bajčan D. 5P03, 5Po69
Bajer T. 5Po04, 5Po68
Bajerová D. 1Po01
Bajuszová J. 1Po02 1Po63
Bakardiev M. 2Po03, 2Po19
Bakardijeva S. 2Po07
Bakoš D. 3Po95
Baldriánová L. 1Po66, 1P14
Balkovic S. 2Po09
Banáš P. 1Po03
Baran P. 2Po74
Baran W. 5Po05, 5Po06, 5Po07
Barančíková G. 5Po59
Barczak M. 1Po64, 1Po72
Barek J. 1PP1, 1Po09, 1Po50, 1Po86
Bareš J. 2Po04, 2Po77
Barták P. 3Po04
Bartoňová L. 2Po05, 2Po06
Bartošová L. 1Po45, 3Po51
Bártová I. 5Po50
Bartusek S. 5P04
Baszczyński O. 3P01
Bazzaoui M. 1Po29
Bdžoch J. 1Po88, 1Po80
Beckert R. 3Po110
Bednáriková A. 1P10
Beinrohr E. 1Po90
Belko I. 5Po19
Bělohav Z. 6P01, 6P08, 6P15
Bělohlavová H. 3Po01
Beneš L. 2Po45, 2Po71
Beneš M. 5Po44, 5Po77
Benito A. 3Po76
Benko J. 1P23, 1P24
Benková Z. 1P23
Beran M. 2Po58
Berek D. 3P08
Bergmann H. 1P11
Berka J. 5Po60
Bertolasi V. 3P22, 3Po69
Běťák J. 3Po54
Bieliková L. 6P21
Bílek, M. 4P03, 4Po03
Bílešová A. 3Po80
Bílková Z. 5Po29
Blafková P. 5Po08, 5Po42
Blaha A. 3Po22, 3Po106
Bláha K. 5P23
Bláhová O. 3P16
Blaško J. 3Po111
Blešová M. 1Po28
Boča R. 2P02
Boduszek B. 3Po61
Boháč A. 3PP3, 3Po02, 3Po80, 3Po111
Boháč M. 1Po48
Bojňanská T. 5Po09
Borecka L. 1Po04
Borek V.A. 5Po83
Borsig E. 3Po15
Boukerma K. 3Po62
Bouman E. A. P. 1Po84
Bouzek K. 1P06, 1P05, 1Po08, 1P11, 6P19, 6P23
Braunerová G. 3Po65
Brázda P. 2Po07
Brescher R. 6P02
Brestenská, B. 4PP2
Brezová V. 1P16, 1Po73
Briňarská D. 1Po83
Brindzová L. 5Po10
Brožek J. 3Po03, 3Po33
Brožek V. 2Po08
Brožová S. 5P04
Bruncko J. 6Po10
Bruner R. 3Po10
Brynych P. 5P10, 5Po76
Brząszcz M. 3P13
Břenková L. 6P08
Búcsi A. 1Po55
Buděšínský M. 3Po45
Budzák D. 6PP1
Bugár I. 1P20, 1Po58, 1Po88, 1Po80
Buchta V. 3Po10, 3Po65, 3Po81, 3Po110
Buchtík R. 1Po05
Bukovský V. 3P20
Burda R. 5Po25, 5Po44
Burdová J. 6P22
Burgert L. 3P11, 3Po40
Bustin D. 1Po10, 1Po22, 1Po91
Bystrická J. 5P08, 5P19, 5Po11, 5P15
Bystrický S. 3Po14
Bystroň T. 1P05

C

Cabal J. 3Po36
Cahlíková L. 5P09
Caisová E. 1Po40
Cankař P. 3Po04, 5Po32

Capek P. 3Po05, 5Po41
Cejpek K. 4Po11
Cíbik B. 6P09
Cibulka R. 3Po06, 3Po20, 3Po87
Cibulková Z. 1Po53
Cihlář J. 1Po25
Cílová Z. 1Po08
Cimrová V. 3Po38, 3Po68
Cingelová J. 6P02
Círová A. 6P24
Císařová I. 2Po03, 2Po20, 2Po37
Claudel S. 3Po61
Coimbra M. A. 5Po71
Coutrot P. 3Po61
Csöllei J. 3Po51
Csomorová K. 3Po34, 3Po48, 3Po56

Č

Čabla R. 3P19
Čajan M. 1Po06, 1P17
Čársky, J. 4P01
Čechová R. 3P18
Čechová Z. 5Po59
Čermák P. 6Po07
Černá J. 5Po42
Černá K. 3Po98
Černák M. 3Po95
Černáková Ľ. 3Po94, 3Po95
Černík M. 2Po86
Černušák I. 1P23, 1P24
Černý M. 3Po01, 3Po07
Červený L. 3Po13, 6P14
Čík G. 1P20
Čimbora J. 5Po37
Čížek K. 1Po09
Čížková V. 4Po02
Čonka P. 3Po08
Čopíková J. 1Po78, 5Po08, 5Po42, 5Po61, 5Po71, 5PP4
Čtrnáctová H. 4P09, 4Po02
Čuba V. 5Po12, 5Po13

D

Damborský J. 1Po03, 1Po48
Dandár A. 5Po18, 5Po30
Danielik V. 1Po14
Danko M. 3P06, 3Po09
Dastych D. 2Po83
Dejmková H. 1Po86
Delijannisová A. 5Po01
Dercová K. 5Po59
Ditkowski B. 3Po18
Dmowski W. 3P02
Dočkalová V. 3Po91
Dohnal V. 3Po55
Doležal K. 1Po16, 1Po43
Doležal M. 3Po10, 3Po55
Doušová B. 2P13, 6Po02
Dovalovská Z. 1Po10
Drábik M. 2P20, 2Po09
Drabina P. 3Po29
Drábková M. 5Po21
Drahoňovský D. 1Po01, 1Po49
Drahota P. 2Po07
Drašar Č. 2P18
Drašar P. 3Po57, 4PP3
Drončovský M. 5Po41
Drtinová B. 5Po13
Dufka Á. 2Po63
Duchéne I. 3Po80
Ďuračková A. 3Po12
Ďuračková Z. 2Po01
Durdil P. 6P08
Dušek K. 3Po12
Dušek L. 3P11
Dušek M. 2Po11
Dušek, B. 4P08
Dušková-Smrčková M. 3Po12
Dvoranová D. 1P16, 1Po73
Dvořák B. 1Po57
Dvořák D. 1P19, 1Po89
Dvořák L. 1Po11, 2Po10
Dvořák Z. 5P06
Dvořáková M. 5Po14
Dzik P. 1Po87, 3Po11, 3Po32

DŽ

Džubák P. 5Po32

E

Ebringerová A. 3Po46, 3Po79
Eisner A. 5Po01, 5Po15
Eliáš M. 2Po08
Erban V. 5Po42
Erben M. 2Po11, 2Po54
Etrych T. 3P10

F

Fadrná, V. 4P10
Fajnor V. Š. 2Po09, 4Po09
Fajt V. 3Po13
Farkačová T. 3P16
Farkaš P. 3Po14
Fazekaš T. 1Po12
Fečková Z. 1Po13
Fedorko P. 3Po62
Fellner P. 2Po02, 2Po31
Feszterová M. 4P06
Fiedlerová A. 3Po15
Fikselová M. 5Po16
Filippi M. 2P13
Fischer P. M. 5Po32
Fišera M. 5Po39
Fišerová A. 2P16, 2Po12
Fitl P. 2Po13
Floch Ľ. 3Po16
Flodrová D. 1Po32
Flórián K. 1Po02
Florián Š. 3Po17
Fojtková K. 2Po14
Frančáková H. 5Po16

Frank V. 2Po15
Fratila M. M. 3Po76
Frčková Z. 3Po111
Frumar M. 2Po35
Frumarová B. 2Po35, 2Po51
Fryčer R. 2Po13
Fryčová M. 3P18
Fuess H. 2Po26

G

Gabčová J. 1Po14
Gajdošová A. 5Po17
Gál M. 1Po15
Galamboš M. 5Po35
Galík M. 1P14
Galková S. 2P06
Gálová Z. 5Po73
Gálusová P. 4Po11
Ganajová, M. 4P07
Ganboa I. 3Po76
Garaj J. 4PP4
Gášek P. 6P02
Gášpár B. 3Po80
Gbelcová H. 2Po01
Gębala M. 3Po18
Gernátová M. 3P09
Giannarelli S. 1Po36
Giurg M. 3P13, 3Po18
Glaser V. 6Po07
Golitková Z. 4Po06
Gonda J. 3Po08, 3Po92, 3Po105
Gondová T. 1Po83
Görner F. 5P24
Gregor Č. 5Po20
Greif G. 5P20
Greifová M. 5P16, 5P20
Greksáková O. 1Po46
Grison C. 3Po61
Grűner B. 2Po37
Gryczová E. 6Po05
Grygar T. 2P12, 2Po62
Grym J. 2Po16, 2Po57
Güllová L. 5Po18, 5Po30
Guschlová Z. 2Po22
Gut V. 3P15
Guyot G. 3P06
Gyepes R. 2P03, 2Po47
Gyepesová D. 3Po19, 3Po47
Győryová K. 2Po55

H

Hajduch M. 1Po16
Hajdůch M. 3Po84
Hajdúch M. 5Po32
Hajduchová Ľ. 6P12
Hájek T. 1Po66
Hájíček J. 3Po45, 3Po60, 3Po70, 3Po83, 3Po96, 3Po99
Hamerníková M. 2Po17
Hampl F. 3Po20, 3Po87
Hanika J. 6P08, 6P10, 6P20
Hanquet G. 3Po109
Hanta V. 6P04, 6P13
Hanusek J. 3P21, 3Po29
Hanzlíková A. 6P09
Hauserová E. 1Po16, 1Po77
Havel L. 1Po56
Havlas Z. 1PP4
Havlica J. 2Po15, 2Po87
Havlíček D. 2P22
Havlíček L. 5Po51
Havlová P. 1Po78
Havlů M. 3Po51
Häring A. 6Po05
Hegedűs O. 5P18, 5P22, 5Po19, 5Po79
Hegedüsová A. 5P18, 5P22, 5Po19, 5Po23, 5Po24, 5Po70, 5Po79
Hejtmánková L. 3P21
Helebrant A. 2Po22, 2Po61
Herčko I. 4PP1
Herink T. 6P01
Heyrovský M. 1P02
Heželová M. 1Po17
Hilbert J. 1Po18, 2P19
Hlaváč J. 3Po84
Hlaváček J. 3P15
Hlaváček P. 3Po106
Hlúbiková S. 1Po90
Hnyk D. 2Po03
Hoblík J. 5Po73
Hobza P. 1Po67
Hoherčáková Z. 1Po19
Hojerová J. 5P24, 5Po03
Holas T. 3Po21
Holecová M. 2Po18
Holéczyová G. 5P01
Holub J. 2Po03, 2Po19
Holubová J. 2P04
Holzhauser P. 1P06, 1P05
Honzíček J. 2P04, 2Po20
Hora L. 2Po21
Horák R. 3Po106
Horáková H. 1Po93
Horáková J. 1Po01, 1Po49
Horká K. 3Po51
Horký J. 5Po33
Horniaková J. 6P06
Horová D. 5Po02
Horváthová R. 2Po61
Hořčicová D. 3P01
Hoskovcová I. 1P19, 1Po89
Hovorka O. 5P09
Hozová B. 5Po17
Hrabálek A. 3Po21
Hrabica J. 2Po75
Hrabinová M. 3Po36
Hradecká H. 2Po22
Hradil P. 3Po84
Hrbáč J. 1Po85, 5Po20
Hrbáček J. 3Po22
Hrčková Ľ. 3Po23
Hrdina R. 3P11, 3Po40
Hrdlička A. 1P22

Hrdličková J. 5Po21
Hrdlovič P. 3P06, 3Po09
Hromádková Z. 3Po79
Hromadová M. 1Po36, 1Po71
Hrozová L. 5Po39
Hrubý M. 3P10, 3Po37, 5Po44
Hrušková M. 5Po67
Hříbalová V. 3Po05
Hubičková M. 2Po23
Hubka T. 5Po22, 5Po57
Hudák A. 5P01
Hudec I. 3Po94
Hudecová D. 2P09, 2Po55, 5PP1, 5Po03, 5Po47, 5Po48
Hulačová H. 3P15
Huong N.T.T. 3Po57
Husáková L. 1Po20

CH

Chalánková J. 5Po15
Chandoga P. 1Po58
Chehimi M. M. 3Po62
Chlpík J. 5P70
Chmela Š. 3P06, 3Po09, 3Po15, 3Po23
Chmielewska E. 1Po47
Chodák I. 3PP2, 3Po26, 3Po52, 3Po58, 3Po59, 3Po97
Chodak K. 3Po103
Chojnacka M. 3Po66
Chomič J. 2Po55
Chomoucká J. 1Po21
Chorvát D. 1Po47, 1Po58, 1Po75, 1Po88
Chovancová J. 1Po21
Chrappová J. 2Po24, 4Po09
Chrástová V. 3Po95
Chromá M. 2Po25
Chromcová D. 3Po03
Chvapil M. 3Po90
Chvátalová R. 5Po34, 5Po43
Chyba V. 6P01, 6P10
Chytil M. 3Po24

I

Imramovský A. 3Po25
Iranda J.I. 3Po76
Iváková M. 1Po12
Ivaniková R. 2Po26

J

Jablonský I. 5Po42
Jain H. 2Po12
Jakabovič J. 6Po08
Jakeš V. 2Po27, 2Po41
Jambor R. 2Po42
Jambrich M. 6PP1, 6P12
Jampílek J. 3Po10
Jamrichová S. 5Po41
Janča J. 2Po08, 2Po80
Jancurová M. 5Po18
Janda V. 5P17, 5Po75
Jandera A. 3Po77
Jandera P. 1Po66
Janderka P. 3P09
Janek M. 1Po88
Janiczek O. 5Po58
Janigová I. 3Po26, 3Po58
Janoš P. 6P22
Jansa P. 3P04
Jantová S. 1P13, 2Po01, 3Po93
Janypka, P. 4Po06
Jašková J. 2Po28, 2P07
Javůrek M. 2Po29
Jedelský J. 2Po35
Jelínek L. 5Po44, 5Po72, 5Po77
Jelínek P. 1P21
Jenčušová P. 1Po22
Jeřábek P. 1Po48
Ježková V. 3Po100
Ježová V. 5Po15
Jimenez A. 3Po76
Jirák J. 2P23, 2Po30
Jirátová K. 2P12, 6P17
Jiříček I. 1Po18, 1Po29, 2P19
Jirsa O. 5Po67
John J. 5Po64, 5Po65
Jomová K. 5P03, 5P18, 5Po19, 5Po23, 5Po24, 5Po70
Jóna E. 2Po64, 2Po66, 3Po63, 3Po64
Jorík V. 2Po64, 3Po64
Jun D. 3Po27, 3Po36, 3Po55
Jung Y.S. 3Po55
Jurdáková H. 3Po111
Jurečková K. 5P23, 5Po25
Jurišová J. 2Po31
Jurka V. 1Po19
Jüttner K. M. 1Po30

K

Kabelová Z. 5Po26
Kafarski P. 5P11
Kafková B. 1Po40
Kahoun D. 5Po68
Kalčíková J. 6P08
Kalina J. 5P05
Kalinová B. 1Po84, 5P09
Kaloforov N. 6P16, 6Po11, 6Po12
Kalousková R. 3Po28, 3Po91
Kaman O. 2P22
Kameníček J. 2Po36
Kameník J. 5Po27
Kaminski M. 2Po84
Kandelová M. 5Po28
Kanický V. 1P22
Kappe C. O. 3Po92
Karovičová J. 5P16, 5P20, 5Po36, 5Po37
Katuščák S. 3P20
Kaustová J. 3Po30, 3Po43, 3Po110
Keder R. 3Po29
Kedžuch S. 1Po23
Khandl V. 2Po31
Kibriková I. 5Po57

Kielar F. 3Po90
Kim T.H. 3Po55
Kirdajová O. 1P24
Kirschnerová S. 3Po34, 6P21
Kittel H. 6P11
Kizek R. 1Po56
Kladeková D. 1P10, 1Po17
Klanicová A. 2Po32
Klečková, M. 4P10, 4Po08
Klein E. 1Po92, 1Po53
Kleinová A. 3P17, 3Po15, 3Po34
Klika Z. 2P11, 2Po05, 2Po06
Klíma J. 1P07
Klimánková K. 2Po17
Klimentová J. 2Po33, 3Po21
Klimešová V. 3Po30, 3Po110
Klimová D. 3Po94
Kloc K. 3Po66
Klučáková M. 1Po24, 4Po01
Koča J. 1P17, 5Po50
Kočí J. 3Po30
Kočica J. 5Po60
Kodíček M. 1P12, 4PP3
Kodým R. 1P06, 1P11
Kodýmová L. 5Po83
Kohajdová Z. 5P16, 5Po37
Kohl L. 5Po84
Kohout L. 1Po77
Kolář K. 4P04, 4Po04
Kolář M. 2Po52, 5Po72
Kolářová K. 2P21
Kolena J. 6P10
Koller L. 1Po02, 1Po63
Kolomazník K. 6Po01, 6Po06, 6Po09
Koloušek D. 2P13
Kolská Z. 1Po25
Komadel P. 2PP3
Koman M. 2P08, 2P09, 2P10, 2P07, 3Po63, 3Po64
Komárek K. 5Po22, 5Po28, 5Po57
Komenda V. 2Po13
Kompertová H. 3P18
Konečná P. 1Po78
Konyushenko E. N. 3Po88
Koóš M. 3Po19, 3Po47
Kopecká M. 2Po57
Kopecký J. 5Po85
Kopecký K. 3Po31, 3Po108
Kopel P. 2Po36
Koplík R. 1P12
Koprda V. 5P12
Koptíková T. 3P18
Korabik M. J. 2P08, 2Po28
Korecká L. 5Po29
Kormanec J. 5PP3
Kościelniak P. 1Po33
Kosina P. 1Po26, 5Po78
Kostičová M. 5Po18, 5Po30
Kostka M. 3Po108
Košíková V. 2Po17
Kotianová P. 5P14
Kotrla R. 5Po40
Koubská O. 2Po17
Koudela M. 3Po102
Koudelka L. 2P23, 2Po30, 2Po56
Koutnik I. 2Po34, 2Po72
Kováč J. 6Po08
Kováčik P. 5Po69
Kováčová S. 3Po02
Kovanda F. 2P12, 2Po62
Kovařík A. 3Po51
Kovařík P. 5Po12
Kovářová J. 3Po73
Kowalska A. 5Po62, 5Po63
Kozempel J. 3Po37
Kozler J. 5Po02, 5Po46
Kraitr, M. 4P05, 4P12
Král V. 5Po83
Králik M. 6P06, 6PP3
Králová I. 3Po11, 3Po32
Kráľová K. 3Po10, 3Po35
Královský J. 5Po01, 5Po68
Kratochvíl, B. 4P11
Kraus A. 3Po111
Kraus L. 2P11
Krausová P. 5Po31
Krbal M. 2Po35
Krbová M. 1Po51
Kredatusová J. 3Po33
Krejčová K. 6Po03
Kremláčková B. 5Po80
Kronek J. 3Po19, 3Po34, 3Po42
Krotká P. 5P23
Krpálková M. 5Po67
Krupa I. 3P17, 3Po48, 3Po56
Krupka J. 3P03, 6P17
Krutišová I. 2Po20
Krýsa J. 2P14, 2Po85, 5Po72
Kryštof V. 2Po32, 5Po32, 5Po51
Kryštofová A. 5Po33
Křen V. 5Po78
Křenková J. 5Po29
Křístková H. 5Po71
Křivánková L. 1Po28
Kříž Z. 5Po50
Křováček M. 3Po20
Kubešová J. 5Po34, 5Po43
Kubicová L. 3Po35, 3Po43, 3Po74, 3Po81
Kubíček J. 5Po02
Kubinec R. 3Po111
Kubová O. 2P05
Kuča K. 3Po27, 3Po36, 3Po55
Kučera I. 5Po58
Kučera J. 5P13
Kučka J. 3P10, 3Po37
Kufčáková J. 5Po35
Kühn J. 5Po54
Kuchař M. 3P14, 3Po77
Kujalová H. 5Po22
Kujová E. 3Po51
Kukla S. 3Po38
Kukľová, L. 4Po07
Kukurová K. 5P16, 5Po36, 5Po37
Kula P. 3Po103

Kulhánek P. 1P17
Kumka A. 3Po66
Kuneš J. 3Po25
Kuráň P. 6P22
Kurc L. 3Po13
Kurečka A. 2Po36
Kusý J. 6P03
Kutnerová P. 4P05
Kutschy P. 3P05
Kuželka R. 3Po57
Kverka M. 3Po77
Kvíčala J. 3P01, 3Po39
Kvíčalová M. 2Po37
Kvítek L. 1Po94, 1Po41, 1Po74, 1Po81, 2Po18, 2Po52
Kytka M. 6Po08

L

Labík S. 4PP3
Labuda J. 1Po27, 1P13
Lachman J. 5Po66
Lacík I. 3Po23
Lácová M. 1P23, 3PP3, 3Po02
Lahučký L. 5P19, 5Po45
Lanfranchi D. A. 3Po109
Lang K. 1P09
Langauf A. 1Po93
Langer V. 3Po19, 3Po47
Langmaier F. 3Po41, 6Po01, 6Po06, 6Po09
Laromaine A. 1Po93
Lasáková M. 1Po66
Lasovský J. 1Po81
Lath D. 3P23
Lazor P. 5Po69, 5Po70
Lebeda O. 3Po37
Lederer J. 6P01, 6P09
Lednický F. 3Po26
Lehkoživová J. 5P16, 5Po37
Lenobel R. 1Po43
Leško J. 3Po49
Leskova J. 5Po38
Lhotka M. 2Po38
Lichvárová, M. 4P07
Linden A. 3Po76
Lis T. 2P06
Liška F. 3Po20, 3Po87, 3Po90
Liška M. 2Po65
Lišková A. 1Po28
Lišková V. 3Po40
Löbl J. 2P01
Londesborough M. G. S. 2Po03
Loníček D. 3Po41
Lošťák P. 2P18
Loupancová B. 5Po39
Lučaníková M. 5P13
Ludvík J. 1P19, 1Po89
Ludwig M. 3Po67, 3Po89
Lukáčová D. 5P16
Lukeš V. 1Po92, 1Po07, 1Po53
Lukešová A. 5Po85
Luňáčková, P. 5Po57
Lundanes E. 1Po18
Luptáková V. 2Po66
Lustoň J. 3Po19, 3Po42
Lux L. 1Po13, 1Po17, 1Po54
Luxová A. 5P09
Luxová J. 2Po39
Luyt A.S. 3Po52
Lyčka A. 3P22, 3Po69, 3Po01

M

2Po62
Macák J. 1Po76, 2P19
Macášek F. 5PP2
Mackových D. 1Po61, 1Po82
Mácová Z. 1Po30
Macuchová S. 5Po34, 5Po40, 5Po43
Mačala J. 5Po49
Magnus V. 1Po05
Macháček M. 3Po43, 3Po81
Macháček P. 3Po39
Macháček V. 3P04, 3P22, 3Po01, 3Po69
Macháčková Z. 2Po40, 2Po47, 2P22
Machníková E. 1Po29, 1Po71
Macho V. 6P02, 6P06, 6P09
Machovič V. 1Po04, 1Po29, 1Po42, 2P13,
Maier V. 1Po01, 1Po49
Májová E. 2Po41
Makowski A. 5Po05, 5Po06
Málek J. 2P15
Malo J. 2P06
Maloň M. 3Po04
Maloň P. 3P15
Man S. 3Po107
Mandel M. 3Po44
Mandelová Z. 3Po45
Manová A. 1Po90
Mansfeld M. 3Po67
Marek J. 1Po76
Marek M. 4P04, 4Po04
Marešková A. 2Po17
Marchalín Š. 3PP1
Marková L. 3Po06
Markušová K. 1P10
Márová I. 5Po21, 5Po34, 5Po40, 5Po43
Maršálek R. 1Po31
Martaus A. 2P13, 6Po02
Martincová J. 2Po42
Martinková M. 3Po92
Martins J. I. 1Po29
Marton S. 6Po03
Maryška M. 2Po61, 5P17
Mastný L. 3Po28
Mašlejová A. 2Po26
Matějka Z. 5P23, 5Po25, 5Po44, 5Po72, 5Po77
Matějková, H. 4Po02
Matherny M. 1Po63, 1Po02
Matisová-Rychlá L. 3P20, 3Po71
Matoušek J. 1P17
Matuchová M. 2Po43
Matulková I. 2Po44

Matulová M 3Po05, 5Po41
Mazíková V. 3Po46
Mazúr M. 1P18, 2P08
Mäsiar H. 6P16, 6Po11, 6Po12
Medová M. 1Po15
Melánová K. 2Po45, 2Po71
Melicháčová S. 5P08, 5Po45
Melicherčík M. 1Po44
Melník M. 2PP2, 2P08, 2P09, 2P10, 2P07, 2Po28, 4P02
Merna J. 2Po11
Mestek O. 1P12
Meunier P. 2Po04
Micle A. 3Po76
Mička Z. 2P03, 2Po44, 2Po47
Míčková K. 5Po42
Mičová J. 3Po47
Mičušík M. 3Po48
Michalík I. 5Po73, 5Po74
Michalka M. 6Po10
Mikelová R. 1Po56
Mikloš D. 2P07, 2P09, 2Po28
Miko M. 2P10
Miková G. 3PP2
Mikulášová M. 3Po94
Mikulcová A. 5Po34, 5Po43
Mikulík J. 1Po11, 2Po10
Mikulíková R. 1Po32, 5Po40
Mikušová K. 3Po95
Mikysek T. 1P14
Milata V. 3Po49
Milczarek J. M. 1Po33
Milde D. 1P15
Miletín M. 3Po31, 3Po65, 3Po108
Milko M. 1Po34
Minc N. 5Po29
Mísařová J. 3Po50, 3Po86
Mišicák D. 1Po35, 1P01
Mištová E. 5Po44, 5Po77
Mitchell T. N. 4PP3
Mládek M. 6Po01, 6Po06, 6Po09
Mlčoch A. 6P07
Młochowski J. 3P13, 3Po18, 3Po66, 3Po103
Mokrejš P. 6Po01, 6Po06, 6Po09
Mokrý P. 1Po45, 3Po51
Möllmann U. 3Po110
Moncol J. 1P18
Montagne L. 2P23
Moravcová M. 5Po51
Moravcová S. 1P06, 1Po08, 6P19, 6P23
Moravec Z. 2Po46
Morovič M. 5Po23
Mořkovská P. 1Po36
Mosinger J. 1P09, 1Po68
Mossakowska I. 3Po66
Mošková D. 3Po46, 3Po52
Mošner P. 2P23, 2Po30, 2Po56
Možíšková P. 1Po37
Mrákavová M. 1Po44
Mravčáková M. 3Po53
Mravec D. 6P06
Mravec F. 3Po54
Mrozinski J. 2P08, 2Po28
Múčka V. 5Po12
Mudroňová D. 2Po55
Muchová Z. 5Po09
Murárová A. 6P12
Muselík J. 6Po03
Musil Z. 3Po31, 3Po108
Musílek K. 3Po36, 3Po55
Musilová J. 5P19, 5Po11, 5Po45, 5P15
Mutzenardt P. 3Po61
Myslík V. 2Po13
Myšák J. 3Po28
Myška, K. 4P04, 4Po04

N

Nádvorník M. 2Po04, 2Po78
Náhlík J. 3Po03, 3Po75
Nápravník V. 4P12
Navrátil T. 1Po38, 1P02
Navrátilová Z. 1Po39
Nečas M. 2Po46, 2Po70
Nedelčev T. 3P17, 3Po56
Němcová I. 1Po40
Nemcová R. 1Po59
Němec I. 2Po40, 2Po44, 2Po47,
Němec M. 5Po64
Němec P. 2Po40, 2Po44
Nesměrák K. 1Po40
Nešpůrek S. 3Po98
Nevěčná T. 1Po41, 1Po48, 1Po74, 2Po18, 2Po52, 4P10
Niederhafner P. 3P15
Nižňanský D. 2Po07
Noga J. 1Po23, 1Po34, 1PP2
Nógellová Z. 3Po58
Noskovič J. 5Po69
Nováčková M. 1Po65
Novák F. 1Po42
Novák I. 3P17, 3Po17, 3Po59, 3Po97
Novák J. 2Po63, 5Po02, 5Po46
Novák M. 4P08
Novák O. 1Po43
Novák P. 2Po78
Novotná M. 1Po76, 5Po26, 6Po05
Novotná P. 2P14
Novotný P. 2Po23
Novotný R. 1Po95

O

Obadal M. 3P19
Obadalová I. 3Po60
Obalová L. 2P12
Ochránková K. 5Po30
Oktábec Z. 3Po101
Olejníková P. 5Po47, 5Po48
Olexová A. 1Po44
Olšovský M. 6P02, 6P06
Olszewski T. 3Po61
Omastová M. 3Po48, 3Po53, 3Po62
Ondráčková J. 2Po48, 2Po49
Ondrejkovičová I. 2P06

Ondrušová D. 2Po65, 3Po63, 3Po64
Ondrušová Z. 5Po47, 5Po48
Opatřilová R. 1Po45
Opatrný P. 4P03, 4Po03
Opekar F. 1Po19
Opletalová V. 3Po27
Oravec P. 5Po49
Oremusová J. 1Po12, 1Po46
Oriňáková R. 1P10
Orsák M. 5Po66
Oslanská J. 1Po47
Ostřížek P. 3P09, 2Po59
Otruba V. 1P22
Otyepka M. 1Po03, 1Po48, 1Po67, 5Po50
Otyepková E. 1Po48
Ovádeková R. 1P13, 1Po27, 3Po93

P

Padělková Z. 2Po50
Paidar M. 6P19
Pajtášová M. 3Po63, 3Po64
Paláčková H. 2Po51
Palát K. 3Po65
Palavit G. 2P23
Palomo C. 3Po76
Pálszegi T. 1Po07, 1Po55, 1Po88
Palus J. 3Po66
Panáček A. 1Po94, 1Po41, 2Po18, 2Po52
Panajotová V. 3Po77
Pandová I. 5Po49
Papánková B. 2Po26
Paprskářová M. 5Po32, 5Po51
Pařík P. 3Po67, 3Po89
Pariláková K. 5Po69, 5P15
Parschová H. 5P23, 5Po25, 5Po77
Pašek J. 6PP2, 6Po04
Patera J. 6P17
Pavlačková P. 3Po68
Pavlath A. E. 2P24, 4P14, 6P05
Pavlica R. 3Po22
Pavlovský J. 1P21
Pawłowska-Góral K. 5Po52
Pechová M. 1Po49
Pecková K. 1Po50
Peczyńska W. 3Po18, 3Po103
Pekař M. 1Po51, 3Po24, 3Po54, 4Po01
Perekalin D. P. 2Po03
Pešková M. 3P22, 3Po69
Petr J. 1Po01, 1Po49, 5Po73
Petřek J. 1Po56
Petříčková H. 3Po96
Petrisko M. 6Po04
Petrlová J. 1Po56
Petrov O. 3Po49
Petrovič P. 1Po52
Petrů J. 2Po53
Piasecki E. 3Po103
Picka M. 2Po54
Piekielska K. 3Po18
Piętka M. 3Po103
Pigošová J. 1Po92, 1Po53, 6P21
Pikna Ľ. 1Po13, 1Po54
Piknová L. 2Po55
Pilarčík T. 3Po70
Pilný O. 1Po24
Pinkas J. 2PP1, 2P01, 2Po46, 2Po59
Pinto T .A. M. D. 3Po40
Pionteck J. 3Po53
Pitter P. 5Po22
Pittner T. 5Po55
Pivec V. 5Po66
Pizúrová N. 2Po52
Plancq B. 3Po06
Pleteníková M. 3P20, 3Po71
Plevová E. 2Po74, 2Po79, 3Po72
Plško, A. 4Po06
Podešva J. 3Po73
Podgrabinski T. 2P17
Podolonovičová J. 1Po59
Podsiadlo S. 2Po84
Poehlmann R. 2P16
Pokluda A. 2Po60
Pokorný R. 5Po47
Poláčková H. 2P04
Polák J. 1P12
Poledna J. 1Po42
Polívka V. 2P19
Polovka M. 6P21
Popa I. 1Po11, 2Po10, 2Po32
Pospíšil J. 2Po56
Pospíšil L. 1Po36, 1Po71
Pospíšil M. 5Po12, 5Po13
Pospišil R. 5P15
Potáček M. 3Po78, 3Po107
Potěšil D. 1Po56
Pötschke P. 3Po53
Potůček F. 3Po82
Poživil J. 6P04, 6P13
Pravda M. 3Po74, 3Po81
Přibylová L. 1Po57
Příhoda J. 2Po58, 2Po73, 2Po81
Přikryl J. 3Po01, 3Po07
Přistoupil T. I. 1P02
Přistoupilová K. 1P02
Procházková O. 2Po16, 2Po57
Prokeš J. 3Po48
Prokeš O. 2Po53, 5Po53
Prokop Z. 1Po03, 1Po48
Prokopová I. 3Po75, 3Po102
Prokůpek L. 6P18, 3Po50, 3Po86
Prónayová N. 3Po49
Prucek R. 1Po94
Ptáček P. 5Po34, 5Po43
Pudil F. 5P17, 5Po75
Pukánszky B. 3Po53
Puxbaum H. 5P14

R

Rábara L. 1Po58
Rabišková M. 6Po03, 6Po05
Radwan-Pytlewska K. 3Po76
Rajec P. 5Po35

Rakovická L. 2Po81
Rakovský E. 2P03
Rapta P. 5Po10
Reiffová K. 1Po59
Reichlová V. 2Po59
Rejnek J. 1Po60
Remeteiová D. 1Po61
Repovská M. 3P05
Rievaj M. 1Po91, 1Po10, 1Po22
Richtera L. 2Po60
Richtr, V. 4P12
Rimarčík J. 1Po92
Rimárová K. 5P01
Robešová L. 5Po54
Roda J. 3Po03, 3Po33
Rödling R. 3Po77
Rodová A. 5Po55
Roháčová J. 1P19, 1Po89
Rohanová D. 2Po61
Rojka T. 2P12, 2Po62
Rolčík J. 5Po32
Roth Z. 5Po56
Rovnaník P. 2Po63
Rozik R. 1Po62, 1P4
Rozsypalová M. 3Po78
Rucki M. 5Po56
Rudinská E. 2Po64, 2Po66
Rudinská G. 2Po65, 3Po63
Rumlerová A. 1Po50
Růžička A. 2Po04, 2Po50, 2Po77, 2Po78
Růžička V. 1Po25
Ružičková S. 1Po02, 1Po63
Rychlý J. 1Po55, 3P20, 3Po34, 3Po56, 3Po71
Rzepecka-Stojko A. 5Po52

Ř

Řádková, O. 4P03
Řehová L. 1Po66
Řezáčová, V. 4Po05
Řezková S. 5Po04, 5Po68
Řičánek M. 6P22
Říhová B. 3PP4
Římanová D. 5Po53

S

5Po42
Sajdl P. 2Po23, 2Po53
Sakowicz J. 1Po64, 1Po72
Sališová M. 3PP3, 3Po02, 3Po80, 4P13, 4PP3
Sapietová M. 2Po64, 2Po66
Sarakha M. 3P06
Sasinková V. 3Po46, 3Po79
Schauer J. 1Po08
Schmidt M. 5Po60
Schmidt Š. 5P07, 5P24, 5Po82
Schneiderová P. 2Po51
Scholtzová E. 2Po68
Schroeter S. 2P16
Schwendt P. 2P03, 2Po24
Sedláček P. 1Po24
Sedláček V. 5Po58
Sedlák M. 3P21, 3Po29, 3Po74
Sedlářová I. 2Po38, 6Po07
Segľa P. 2P07, 2Po28
Seidlerová J. 1Po65, 5Po38
Seitlová I. 2Po67
Sejáková Z. 5Po59
Sejbal J. 1Po40, 1Po68
Sekretár S. 5P07, 5Po82
Selucký P. 2Po37
Semak V. 3Po80
Sendrejová E. 5Po74
Severa Z. 3P03
Sihelníková L. 5Po61
Silber R. 5Po12
Sillanpää R. 2Po28
Sirotek, V. 4P05, 4P12
Skála P. 3Po81
Skalický M. 3Po39
Sklenovský P. 1Po67
Skotnicová I. 3Po82
Sládkovičová M. 3Po19
Slavětínská L. 1Po68
Slavíková M. 3Po83
Slepička P. 2P17, 2Po69
Slouka J. 3Po04, 3Po85, 5Po32
Slovák V. 1Po69
Sminčáková E. 1Po61
Smrčková O. 2Po27, 2Po41
Smreková E. 1Po70
Sochacka J. 5Po07, 5Po62, 5Po63
Soják L. 3Po111
Sokolová R. 1Po71
Soukupová J. 1Po41
Soukupová V. 5Po36
Soural M. 3Po84
Sperling J. 1Po07
Spěváček 3P07
Spíchal Z. 2Po70
Sroka A. 1Po64, 1Po72
Sroková I. 3Po46, 3Po79
Stachová P. 2P08
Staffová P. 5Po64
Stankovský Š. 3Po93
Stanovič R. 5P19, 5Po45
Starkbaumová L. 6P01, 6P15
Staško A. 1Po73
Steiner B. 3Po47
Stejskal J. 3Po88
Steklá M. 6Po03
Stoklasa K. 3P19
Střelec M. 1Po90
Strnad M. 1Po05, 1Po16, 1Po43, 1Po77, 5Po32, 5Po51
Strnadová H. 1Po74
Stupavská M. 1Po75
Stýskal J. 3Po85
Stýskalová L. 3Po85
Suchánek M. 5Po71
Suchý O. 1Po76
Suhaj M. 5Po37

Sváta J. 6P11
Svoboda J. 2Po45, 2Po71
Svoboda L. 3Po50, 3Po86, 6P18
Svoboda L. 5P02, 5Po54
Svobodová E. 3Po87
Svobodová I. 2Po26
Swaczynová J. 1Po77
Sýkora T. 6Po05
Sýkora V. 5Po22
Sýkorová D. 2Po27, 2Po41
Sýkorová J. 6P12
Synytsya A. 1Po78, 5Po08, 5Po61, 5Po71
Synytsya Alla 5Po42
Sysel P. 3P18
Szöcs V. 1Po07, 1Po88

Š

Šafařík I. 5Po22, 5Po28, 5Po57
Šafaříková M. 5Po22, 5Po28, 5Po57
Šafářová M. 6P03
Šantrůček J. 1P12
Šašek V. 3Po03, 3Po75
Šebesta F. 5P13, 5Po27, 5Po65, 5Po77
Šeděnková I. 3Po88
Šenauerová S. 3Po89
Šenholdová Z. 1P02
Ševčík J. 1Po01, 1Po49
Ševčík Peter 1Po35, 1P01
Ševčík Petr 2Po34, 2Po72, 2Po73
Šiarnik M. 6P12
Šilhánková A. 3Po90
Šimánek V. 5Po78
Šimek J. 3Po28, 3Po91, 6P01, 6P10
Šimíčková M. 6P10
Šimon P. 2Po65
Šimůnek P. 3P22, 3Po69
Šimůnková K. 3Po22
Šindelář Z. 2Po36
Šivová M. 3Po17
Škarbová B. 5P08, 5P21, 5Po81
Škeříková V. 1Po66
Škrabeková D. 1Po59
Škriniarová J. 6Po10
Škvára F. 2Po21
Šlouf M. 3P16
Šnauko M. 3P08
Šňupárek J. 3Po50, 3Po86
Šoltýsová H. 1Po61
Šoteková M. 3Po92
Šoukal F. 2Po87
Šourek V. 2Po77
Špacayová K. 1Po83
Špirková J. 2Po48, 2Po49
Špirková K. 1P13, 3Po93
Špírková M. 3P16
Špunda V. 5P05
Šrámková J. 1Po20
Šrank Z. 3Po28
Šrobar F. 2Po16
Šrůta P. 5P17
Štanga Š. 3Po02
Štechová K. 3Po94, 3Po95
Štepánek I. 1Po27
Štěpánková H. 3Po96
Štetinová J. 3Po49
Števiar M. 3Po58, 3Po97
Štíbr B. 2Po03, 2Po19
Štich I. 2PP4
Štoudková H. 5Po39
Šugárková V. 2Po74, 3Po72
Šuľaková J. 5Po65
Šulc M. 5Po66
Šulcová P. 2Po29, 2Po39, 2Po75, 2Po76, 2Po82
Šulcová, J. 4Po06
Šuri P. 3Po63
Šurina I. 3Po16
Šustr M. 3Po35, 3Po43
Švadlák D. 2P15
Švancara I. 1P14
Švarcová M. 6Po05
Švec I. 5Po67
Švec P. 2Po78
Švorčík V. 2P05, 2P17, 2P22, 2Po69

T

Takácsová M. 5Po10
Taraba J. 3Po107, 2Po14, 2Po60, 2Po67, 2Po86
Tegai A. 1Po66
Teixidor F. 1Po93
Tesařová E. 1P14
Teubner K. 2Po44, 2Po40
Theodoridis G. 1Po66
Tihlářová E. 5Po34, 5Po43
Tichý M. 5Po56
Timoracká M. 5P08, 5P21, 5Po11, 5Po81
Tisovská L. 3Po96
Tomanová J. 3Po27
Tomasik P. 3P12
Tomáš J. 5P03, 5P21, 5Po69, 5Po70, 5Po81
Tomášek V. 6P08
Tomčík P. 1Po22, 1Po91
Topičová P. 4P10
Topinková J. 1Po79, 1P04
Tóth T. 5Po24, 5P15, 5P18, 5P21, 5Po11, 5Po70, 5Po81
Toužin J. 2Po60
Trávníček Z. 1Po06, 1Po11, 2Po10, 2Po32
Trebichalský P. 5P19, 5Po11
Treindl Ľ. 1Po44
Trejbal J. 6Po04
Trchová M. 3Po62, 3Po88
Trilčová A. 5Po71
Trnková L. 1Po54, 1Po56, 1Po62, 1Po79, 1P04
Trojan M. 2Po29, 2Po39, 2Po75, 2Po76
Trpišovský A. 5Po72
Třešňáková P. 2Po48, 2Po49
Tukač V. 6P10
Tůma M. 2Po76

Tůma P. 1Po19
Tunega D. 2Po09
Tur`yan Y. I. 1Po85
Tyrpekl V. 2Po07

U

Uher C. 2P18
Uher M. 5Po08
Uhlár M. 1P24
Ulbrich K. 3PP4, 3P10, 3Po37
Ulrichová J. 5P06, 5Po78
Urbančík P. 2Po80
Urminská D. 5Po73, 5Po74
Uvíra R. 5P17, 5Po75

V

Vaculíková L 1Po39, 2Po79, 3Po72
Vajcíková Z. 4Po11, 4Po12
Vala M. 3Po98
Valent I. 1Po52, 1Po70, 1P03
Valentová H. 3Po12
Valentová K. 5Po78
Valigura D. 2P08, 2P09
Valko M. 1P16, 1P18
Valkovič, J. 4P13
Valterová I. 5P09, 5Po14
Vaněk P. 2Po40
Vaněk T. 5Po14
Varečka Ľ. 5Po47, 5Po48
Varga Š. 1Po34
Vargová A. 5P18, 5P22, 5Po79
Vargová Z. 2Po55
Vasileská, M. 4Po10
Vávrová K. 3Po21
Večeřa M. 3Po50, 6P18
Vejpravová J. 2Po07
Velič D. 1P20, 1Po47, 1Po58, 1Po75, 1Po88, 1Po80
Velíšek P. 3Po99
Ventura K. 5Po01, 5Po04, 5Po15
Veřmiřovský, J. 4P14
Veselá L. 5Po55
Veselá M. 5Po80
Veselý M. 1Po21, 1Po37, 1Po87, 3Po11, 3Po32, 5Po80
Vespalec R. 1Po93
Vetchý D. 6Po05
Vídenský J. 6Po07
Vidláková P. 2Po81
Vidláková T. 5Po21
Vícha R. 3Po100
Vinas C. 1Po93
Vincze A. 6Po08
Vinklárek J. 2P04, 2Po20, 2Po51, 2Po54
Vinšová J. 3Po25, 3Po101
Viovy J.L. 5Po29
Višňovcová Z. 4Po12
Vitásek J. 3Po75, 3Po102
Víteček J. 1Po56
Vítová E. 5Po39
Vizárová K. 3Po34, 6P21
Vlček M. 2P16, 2Po12, 2Po35
Vojtěchovská J. 1Po81
Vojteková V. 1Po82, 1Po83, 5P01
Vojtíšek P. 2Po33
Vojtko J. 1P08
Voldřich M. 5Po36
Vollárová O. 1P23, 1P24
Vollmannová A. 5P03, 5P08, 5P21, 5Po45, 5Po81
Volný T. 6Po05
Vondrová I. 5Po02
Vopálka D. 2P11
Voráč Z. 2Po80
Vorlová L. 6Po03
Voznicová R. 2Po81
Voženilková J. 2Po82
Vrkočová M. 4P14
Vrňata M. 2Po13
Vrška M. 3Po34, 6P21
Vrzal R. 5P06
Výprachtický D. 3Po38, 3Po68
Vyšvařil M. 2Po83
Vytřas K. 1P14

W

Wagner P. 2Po21
Wágner T. 2Po35
Wagnerová D. 1P09
Waisser K. 3Po110
Wardas M. 5Po52
Wardas P. 5Po52
Wardas W. 5Po05, 5Po06, 5Po07
Weishauptová Z. 1Po04
Weiss D. 3Po110
Weiter M. 3Po98
Wiech E. 3Po18
Wieczorek P. 2Po84
Winterová R. 1Po32
Wójcik G. 3Po66
Wojtowicz H. 3P13, 3Po103
Wolański M. 3Po18
Wolfová L. 3Po104

Y

Yosypchuk B. 1Po38

Z

Zábranský 1Po25
Zadora G. 1Po33
Zádrošová A. 3Po105
Zahajská L. 3Po30
Zahradníčková H. 1Po84
Zahradník I. 1P03
Zahradníková A. 1P03
Zahradníková L. 5P07, 5Po82
Zachař P. 5Po83, 5Po84
Zachová B. 3Po106
Zachová H. 3Po107
Zálešáková J. 4P01
Zámostný P. 6P01, 6P15

Zaorálková L. 1P22
Zatloukal M. 1Po05
Zaujec D. 5P03
Zavadil J. 2Po43, 2Po57
Zdráhalová Z. 5Po04
Zeleňák V. 2Po55
Zelený T. 1Po85, 5Po20
Zelík P. 5Po85
Zerzánková L. 1Po62, 1P04
Zhou Z. 2P18
Zięba-Palus J. 1Po33
Zierhut A. 3Po100
Zima J. 1Po09, 1Po50, 1Po86
Zima M. 5Po23, 5Po24
Zima V. 2Po45, 2Po71
Zimčík P. 3Po31, 3Po108
Zita J. 1Po37, 1Po87
Zlámal M. 2Po85
Zmeškal O. 3Po98
Zoufalý T. 5P10, 5Po76
Zuman P. 1Po95, 3P24

Ž

Žáčková P. 5Po55
Žák P. 2Po86
Žák Z. 2Po60, 2Po67
Žatko D. 3Po80, 3Po109
Žďánský K. 2Po43, 2Po57
Želiba L. 5Po41
Žitňan M. 1P20, 1Po88
Žuk P. 2Po84
Žúrková Ľ. 2P03

PROGRAM PREDNÁŠOK

Sekcia 1 - Analytická a fyzikálna chémia

Miestnosť: podľa plánu miestností na obálke (žltý farebný kód)

Pondelok, 5. septembra 2005

14:20 - 14:30		**Úvodná informácia garantov sekcie**
		Predsedajúci: A. Staško
14:30 - 15:20	**1PP1**	J. Barek
		Kam směřuje elektroanalytická chemie
15:20 - 15:45	1P01	P. Ševčík, D. Mišicák, Ľ. Adamčíková
		Produkcia oxidu uhličitého v oscilačnej, Belousov - Žabotinského reakcii s kyselinou oxálovou
15:45 - 16:15		**Prestávka s občerstvením**
		Predsedajúci: J. Barek
16:15 - 16:40	1P02	T. Navrátil, Z. Šenholdová, K. Přistoupilová, T. I. Přistoupil, M. Heyrovský
		Využití voltametrie ke sledování metabolismu cysteinu v lidském organismu
16:40 - 17:05	1P03	I. Valent, A. Zahradníková, I. Zahradník
		Modelovanie dynamiky pufrovania Ca^{2+} iónov v dyáde bunky srdcového svalu
17:05 - 17:30	1P04	L.Trnková, R. Rozik, J. Topinková, L. Zerzánková
		Analytické aplikace eliminační voltametrie
17:30 - 17:55	1P05	T. Bystroň, K. Bouzek, P. Holzhauser
		Potenciálově modulovaná výměna iontů v polypyrrolovém filmu
20:00 - 24:00	Po	**Posterová prezentácia 1: 2Po01-2Po87, 3Po01-2Po111**

Utorok, 6. septembra 2005

		Predsedajúci: P. Ševčík
08:30 - 08:55	1P06	K. Bouzek, S. Moravcová, P. Holzhauser, R. Kodým
		Vodivé polymery jako nosiče katalyzátoru v nízkoteplotních palivových článcích
08:55 - 09:45	**1PP2**	J. Noga
		Smerom ku spektroskopickej presnosti pri kvantovochemických výpočtoch
09:45 - 10:15		**Prestávka s občerstvením**
		Predsedajúci: J. Noga
10:15 - 10:40	1P07	J. Klíma
		Sonochemie: simulace rozložení intenzity ultrazvuku a optimalizace tvaru ultrazvukového reaktoru
10:40 - 11:05	1P08	J. Vojtko
		Stanovenie rýchlosti esterifikácie
11:05 - 11:30	1P09	J. Mosinger, K. Lang, D. M. Wagnerová
		Supramolekulární sensitizery
11:30 - 11:55	1P10	A. Bednáriková, R. Oriňáková, K. Markušová, D. Kladeková
		Optimalizácia podmienok vylučovania PMMA povlaku na častice Fe prášku
20:00 - 24:00	Po	**Posterová prezentácia 2: 1Po01-1Po95, 4Po01-4Po12, 5Po01-5Po85, 6Po01-6Po12**

Streda, 7. septembra 2005

		Predsedajúci: J. Labuda
08:30 - 09:20	**1PP3**	D. Kaniansky
		Analytická chémia na čipoch
09:20 - 09:45	1P11	R. Kodým, H. Bergmann, K. Bouzek
		Modelování cely pro přímou elektrochemickou dezinfekci pitné vody
09:45 - 10:15		**Prestávka s občerstvením**
		Predsedajúci: P. Zuman
10:15 - 10:40	1P12	J. Polák, O. Mestek, R. Koplík, J. Šantrůček, M. Kodíček
		Speciační analýza stopových prvků v potravinách rostlinného původu
10:40 - 11:05	1P13	R. Ovádeková, K. Špirková, S. Jantová, J. Labuda
		Novel electrochemical method for the sensitive determination of damage to DNA with carbon nanotubes-based biosensor

11:05 - 11:30	1P14	I. Švancara, M. Galík, T. Mikysek, L. Baldrianová, E. Tesařová, K. Vytřas Vybrané kapitoly z elektroanalýzy na uhlíkových pastových elektrodách
11:30 - 11:55	1P15	D. Milde Možnosti atomové absorpční spektrometrie v analýze klinických materiálů
12:00 - 14:30		**Obed**
		Predsedajúci: M. Mazúr
14:30 - 14:55	1P16	D. Dvoranová, V. Brezová, M. Valko EPR study of photochemical processes in carotenoids
14:55 - 15:45	**1PP4**	Z. Havlas Relativistické efekty v organických biradikálech
15:45 - 16:15		**Prestávka s občerstvením**
		Predsedajúci: Z. Havlas
16:15 - 16:40	1P17	J. Matoušek, P. Kulhánek, M. Čajan, J. Koča Kvantově-chemická studie reorganizace sítě vodíkových vazeb v molekule calix[4]arenu
16:40 - 17:05	1P18	M. Mazur, J. Moncol, M. Valko Quantitative EPR spectroscopy - an accurate positioning of each sample in the cavity is essential
17:05 - 17:30	1P19	J. Ludvík, J. Roháčová, I. Hoskovcová, D. Dvořák Elektrochemické studium intramolekulárních elektronických interakcí v aminokarbenových komplexech chromu
17:30 - 17:55	1P20	I. Bugár, M. Žitňan, D. Velič, G. Čík Femtosekundová laserová spektroskopia fluorescenčných vlastností polytiofénov

Štvrtok, 8. septembra 2005

		Predsedajúci: L. Trnková
08:30 - 08:55	1P21	J. Pavlovský, P. Jelínek Alkalické silikátové roztoky vodních skel, struktura těchto roztoků a její význam pro chemickou a fyzikální konverzi sol-gel
08:55 - 09:20	1P22	V. Kanický, L. Zaorálková, A. Hrdlička, V. Otruba Laser ablation inductively coupled plasma spectrometry for depth profile analysis of metal and ceramic coatings
09:20 - 09:45	1P23	J. Benko, O. Vollárová, I. Černušák, M. Lácová, Z. Benková, M. Aranyosiová Príprava a vlastnosti nových derivátov 2-etoxychromónov
09:45 - 10:15		**Prestávka s občerstvením**
		Predsedajúci: J. Labuda, A. Staško
10:15 - 10:40	1P24	I. Černušák, O. Kirdajová, O. Vollárová, J. Benko, M. Uhlár Interactions of monovalent cations with acetonitrile
10:40 - 11:55		**Panelová diskusia, záver**

Sekcia 2 - Anorganická a materiálová chémia

Miestnosť: podľa plánu miestností na obálke (modrý farebný kód)

Pondelok, 5. septembra 2005

14:20 - 14:30		**Úvodná informácia garantov sekcie**
		Predsedajúci: M. Koman
14:30 - 14:55	2P01	J. Löbl, J. Pinkas Příprava a charakterizace nových derivatů alumazenu
14:55 - 15:45	**2PP1**	J. Pinkas Od molekulárních prekurzorů k materiálům
15:45 - 16:15		**Prestávka s občerstvením**
		Predsedajúci: M. Drábik
16:15 - 16:40	2P02	R. Boča Molecule-based magnets
16:40 - 17:05	2P03	Ľ. Žúrková, E. Rakovský, R. Gyepes, P. Schwendt, Z. Mička Kryštalografické aspekty anorganicko-organických hybridných zlúčenín na báze oxovanadičnanov
17:05 - 17:30	2P04	J. Vinklárek, J. Honzíček, H. Poláčková, J. Holubová. Cytostaticky aktivní vanadocenové komplexy

17:30 - 17:55	2P05	O. Kubová, V. Švorčík Vrstvy uhlíku a jejich využití ve tkáňovém inženýrství
20:00 - 24:00	Po	**Posterová prezentácia 1: 2Po01-2Po87, 3Po01-2Po111**

Utorok, 6. septembra 2005

		Predsedajúci: P. Komadel
08:30 - 09:20	**2PP2**	M. Melník Coordination and bio-coordination chemistry: The past, present and future
09:20 - 09:45	2P06	I. Ondrejkovičová, J. Malo, S. Galková, T. Lis Tiokyanáto-železité a železnaté komplexy
09:45 - 10:15		**Prestávka s občerstvením**
		Predsedajúci: J. Pinkas
10:15 - 10:40	2P07	P. Segľa, D. Mikloš, J. Jašková, M. Koman, M. Melník Synthesis, spectral proporties and crystal structures of copper(II) pyridinedicarboxylate adducts with chelating ligands
10:40 - 11:05	2P08	P. Stachová, M. Korabik, M. Koman, M. Melník, J. Mrozinski, M. Mazúr, D. Valigura Štruktúra a vlastnosti nitrozobenzoátomeďnatých komplexov s ronikolom
11:05 - 11:30	2P09	D. Valigura, P. Stachová, M. Koman, D. Mikloš, M. Melník, D. Hudecová, M. Miko Benzoáto a salicylátomeďnaté komplexy - štruktúra, vlastnosti a ich perspektívy
11:30 - 11:55	2P10	M. Koman, M. Melník The structural study of selected copper(II) carboxylates with tridentate chelating ligands
20:00 - 24:00	Po	**Posterová prezentácia 2: 1Po01-1Po95, 4Po01-4Po12, 5Po01-5Po85, 6Po01-6Po12**

Streda, 7. septembra 2005

		Predsedajúci: Ľ. Žúrková
08:30 - 08:55	2P11	Z. Klika, L. Kraus, D. Vopálka Zachycování Cs na bentonitech - adsorpce nebo iontová výměna?
08:55 - 09:45	**2PP3**	P. Komadel Smektity, chemicky zaujímavé ílové minerály
09:45 - 10:15		**Prestávka s občerstvením**
		Predsedajúci: I. Štich
10:15 - 10:40	2P12	F. Kovanda, T. Rojka, K. Jirátová, L. Obalová, T. Grygar Směsné oxidy připravené tepelným rozkladem Co-Mn-Al hydrotalcitů a jejich katalytické vlastnosti
10:40 - 11:05	2P13	B. Doušová, M. Filippi, A. Martaus, D. Koloušek, V. Machovič Stabilita forem arsenu v čistých a kontaminovaných zeminách
11:05 - 11:30	2P14	P. Novotná, J. Krýsa Anorganicko-organické vrstvy na skle
11:30 - 11:55	2P15	D. Švadlák, J. Málek Příme sledování kinetiky růstu krystálů Sb_2S_3 ve sklovité matrici $(GeS_2)_{0,2}$ $(Sb_2S_3)_{0,8}$
12:00 - 14:30		**Obed**
		Predsedajúci: M. Melník
14:30 - 14:55	2P16	M. Vlček, S. Schroeter, A. Fišerová, R. Poehlmann Tvorba mikro- a nanostruktur v amorfních chalkogenidech a aplikace jevu
14:55 - 15:45	**2PP4**	I. Štich Hrotom indukované procesy: nanomanipulácia a mechanochémia
15:45 - 16:15		**Prestávka s občerstvením**
		Predsedajúci: R. Boča
16:15 - 16:40	2P17	T. Podgrabinski, P. Slepička, V. Švorčík Charakterizace tenkých polymerních vrstev připravovaných metodou spin coating
16:40 - 17:05	2P18	P. Lošťák, Č. Drašar, Z. Zhou, C. Uher Some properties of the novel diluted magnetic semiconductors $Sb_{2-x}V_xTe_3$
17:05 - 17:30	2P19	I. Jiříček, J. Hilbert, J. Macák, V. Polívka Steam chemistry impact on materials in power generation
17:30 - 17:55	2P20	M. Drábik Možnosti a limity termickej analýzy v chémii materiálov

Štvrtok, 8. septembra 2005

		Predsedajúci: M. Drábik
08:30 - 08:55	2P21	K. Kolářová, V. Švorčík Biokompatibilita modifikovaného polyethylenu
08:55 - 09:20	2P22	D. Havlíček, O. Kaman, Z. Macháčková. K protonové vodivosti kyselých fosforečnanů vybraných organických bází
09:20 - 09:45	2P23	L. Koudelka, J. Jirák, P. Mošner Struktura a vlastnosti lithium-zinečnatých borofosfátových skel
09:45 - 10:15		**Prestávka s občerstvením**
		Predsedajúci: P. Komadel
10:15 - 10:40	2P24	A. E. Pavlath Biodegradable household materials
10:40 - 11:55		**Panelová diskusia, záver**

Sekcia 3 - Organická chémia a polyméry

Miestnosť: podľa plánu miestností na obálke (červený farebný kód)

Pondelok, 5. septembra 2005

14:20 - 14:30		**Úvodná informácia garantov sekcie**
		Predsedajúci: A. Boháč
14:30 - 14:55	3P01	J. Kvíčala, O. Baszczyński, D. Hořčicová Příprava a reakce C_2-symetrických dibromidů
14:55 - 15:20	3P02	W. Dmowski The Application of Halotane and Sodium Dithionite to the Synthesis of Compounds Containing the Trifluoromethyl group
15:20 - 15:45	3P03	Z. Severa, J. Krupka Vliv přítomnosti nekorespondujících aminů na kinetiku hydrogenace nitrilů
15:45 - 16:15		**Prestávka s občerstvením**
		Predsedajúci: V. Milata
16:15 - 17:05	**3PP1**	Š. Marchalín Nové trendy v chémii dihydropyridínov
17:05 - 17:30	3P04	P. Jansa, V. Macháček Efektivní syntézy opticky čistých derivátů kyseliny 1,2,3,4-tetrahydroisochinolín-3-karboxylové
17:30 - 17:55	3P05	M. Repovská, P. Kutschy Syntéza analógov nukleozidov odvodených od indolových fytoalexínov
20:00 - 24:00	Po	**Posterová prezentácia 1: 2Po01-2Po87, 3Po01-2Po111**

Utorok, 6. septembra 2005

		Predsedajúci: K. Ulbrich
08:30 - 08:55	3P06	P. Hrdlovič, Š. Chmela, M. Danko, M. Sarakha, G. Guyot Spectral characteristics of Probes Based on Benzothioxanthone and Hindered Amine in Solution and in Polymer Matrices
08:55 - 09:20	3P07	J. Spěváček Studium teplotou-indukované fázové separace ve vodných roztocích polymerů NMR spektroskopií
09:20 - 09:45	3P08	D. Berek, M. Šnauko Liquid Chromatography of Synthetic Polymers under Limiting Conditions of Adsorption or Desorption
09:45 - 10:15		**Prestávka s občerstvením**
		Predsedajúci: Š. Chmela
10:15 - 11:05	**3PP2**	I. Chodák, G. Miková Biodegradovateľné plasty - súčasný stav a perspektívy pre vysokotonážne aplikácie
11:05 - 11:30	3P09	P. Janderka, P. Ostřížek, M. Gernátová Použití nafionové membrány v membránovém vstupu hmotnostního spektrometru

11:30 - 11:55	3P10	M. Hrubý, T. Etrych, J. Kučka, K. Ulbrich Polymerní nosiče léčiv s hydroxybisfosfonátovými skupinami pro cílený transport do kostní tkáně
20:00 - 24:00	Po	**Posterová prezentácia 2: 1Po01-1Po95, 4Po01-4Po12, 5Po01-5Po85, 6Po01-6Po12**

Streda, 7. septembra 2005

		Predsedajúci: Š. Marchalín
08:30 - 08:55	3P11	L. Dušek, R. Hrdina, L. Burgert Sulfonované deriváty DPP pigmentů a možnosti jejich průmyslového využití
08:55 - 09:20	3P12	P. Tomasik Polysaccharides and Development of Chemical Industry in Approaching Half-century
09:20 - 09:45	3P13	J. Młochowski, M. Brząszcz, M. Giurg, H. Wojtowicz Recoverable Organoselenium Catalysts
09:45 - 10:15		**Prestávka s občerstvením**
		Predsedajúci: J. Kvíčala
10:15 - 11:05	**3PP3**	A. Boháč, M. Sališová, M. Lácová, G. Addová Medicínska chémia vo vývoji nových typov kancerostatík - inhibítory angiogenézy
11:05 - 11:30	3P14	M. Kuchař Některá úskalí současného výzkumu a vývoje léčiv
11:30 - 11:55	3P15	J. Hlaváček, P. Niederhafner, V. Gut, H. Hulačová, P. Maloň Synthesis of bis-Cystinyl Fragments of Human IgG1 Hinge Region in Solution and on the Solid and Soluble Polymers
12:00 - 14:30		**Obed**
		Predsedajúci: M. Omastová
14:30 - 14:55	3P16	M. Špírková, M. Šlouf, O. Bláhová, T. Farkačová Povrchové vlastnosti nanokompositních nátěrů
14:55 - 15:20	3P17	I. Krupa, T. Nedelčev, A. Kleinová, I. Novák Povrchová modifikácia polyolefínov očkovaním organofunkčnými silánmi
15:20 - 16:45	3P18	P. Sysel, T. Koptíková, H. Kompertová, R. Čechová, M. Fryčová Polyimidy na bázi 1,3-xylylendiaminu
15:45 - 16:15		**Prestávka s občerstvením**
		Predsedajúci: I. Chodák
16:15 - 17:05	**3PP4**	K. Ulbrich, B. Říhová Polymerní systémy pro přípravu protrahovaných a cílených forem léčiv
17:05 - 17:30	3P19	R. Čabla, M. Obadal, K. Stoklasa Cold-Crystallization of Syndiotactic Polystyrene
17:30 - 17:55	3P20	J. Rychlý, L. Matisová-Rychlá, V. Bukovský, M. Pleteníková, S. Katuščák Vplyv deacidifikácie lignín-obsahujúceho papiera na jeho stabilitu pri mechanickej a termo-oxidačnej degradácii-využitie chemiluminiscenčnej metódy pri hodnotení niektorých vlastností

Štvrtok, 8. septembra 2005

		Predsedajúci: P. Hrdlovič
08:30 - 08:55	3P21	J. Hanusek, M. Sedlák, L. Hejtmánková Tandemové recyklizační reakce isothiouroniových solí odvozených od pyrrolidin-2-onu a piperidin-2-onu
08:55 - 09:20	3P22	P. Šimůnek, M. Pešková, V. Bertolasi, V. Macháček, A. Lyčka New Method of Preparation of 1-Aryl-4-amino-5-5-aryldiazenylpyridazinium salts
09:20 - 09:45	3P23	S. M. Aqeel, D. Lath Thermodynamic Compatibility of poly(n-hexyl methacrylate) - Polymethylene System
09:45 - 10:15		**Prestávka s občerstvením**
		Predsedajúci: V. Milata, M. Omastová
10:15 - 10:40	3P24	P. Zuman Kovalentní hydratace některých karbonylových a azometínových skupin
10:40 - 11:55		**Panelová diskusia, záver**

Sekcia 4 - Vyučovanie a história chémie

Miestnosť: podľa plánu miestností na obálke (fialový farebný kód)

Pondelok, 5. septembra 2005

14:20 - 14:30		**Úvodná informácia garantov sekcie**
		Predsedajúci: M. Melník
14:30 - 15:20	**4PP1**	I. Herčko
		Ignác Anton Born a prvý európsky vedecký zjazd chemikov a metalurgov v Sklených Tepliciach v roku 1786
15:20 - 15:45	4P01	J. Čársky, J. Zálešáková
		História výskumu prírodných minerálnych liečivých vôd na Slovensku
15:45 - 16:15		**Prestávka s občerstvením**
		Predsedajúci: J. Čársky
16:15 - 16:40	4P02	M. Melník
		Women in science
20:00 - 24:00	Po	**Posterová prezentácia 1: 2Po01-2Po87, 3Po01-2Po111**

Utorok, 6. septembra 2005

		Predsedajúci: H. Čtrnáctová
08:30 - 08:55	4P03	M. Bílek, P. Opatrný, O. Řádková
		Integrační tendence ve vyuce přírdovědných předmetů: příležitost nebo hrozba pro výuku chemie?
08:55 - 09:45	**4PP2**	B. Brestenská
		Premena tradičnej školy na modernú školu 21. storočia
09:45 - 10:15		**Prestávka s občerstvením**
		Predsedajúci: H. Čtrnáctová
10:15 - 10:40	4P04	M. Marek, K. Myška, K. Kolář
		Využití vzorců a modelů ve výuce chemie
10:40 - 11:05	4P05	V. Sirotek, M. Kraitr, P. Kutnerová
		Problematika výpočtových úloh ve výuce chemie
11:05 - 11:30	4P06	M. Feszterová
		Orientácia študentskej vedeckej odbornej aktivity na územnú ochranu prostredia v okolí závodu Duslo, a.s. Šaľa
11:30 - 11:55	4P07	M. Ganajová, M. Lichvárová
		Efektívnosť ďalšieho vzdelávania učiteľov chémie na Slovensku prostredníctvom dištančnej vzdelávacej technológie
20:00 - 24:00	Po	**Posterová prezentácia 2: 1Po01-1Po95, 4Po01-4Po12, 5Po01-5Po85, 6Po01-6Po12**

Streda, 7. septembra 2005

		Predsedajúci: M. Bílek
08:30 - 09:20	**4PP3**	P. Drašar, M. Kodíček, S. Labík, M. Sališová, T. N. Mitchell
		Koncepce chemického eurobakaláře
09:20 - 09:45	4P08	B. Dušek, M. Novák
		Interaktivní centra poznávání
09:45 - 10:15		**Prestávka s občerstvením**
		Predsedajúci: M. Bílek
10:15 - 10:40	4P09	H. Čtrnáctová
		Chemické vzdělávání a moderní technologie
10:40 - 11:05	4P10	M. Klečková, T. Nevěčná, V. Fadrná, P. Topičová
		Asistent učitele rozšíření pedagogické praxe budoucích učitelů chemie
11:05 - 11:30	4P11	B. Kratochvíl
		Pilulka - dobro i zlo!
11:30 - 11:55	4P12	M. Kraitr, V. Sirotek, V. Richtr, V. Nápravník
		Krátkodobý studijný pobyt ve výrobních závodech jako součást dalšího vzdělávání učitelů chemie
12:00 - 14:30		**Obed**

		Predsedajúci: M. Klečková
14:30 - 14:55	4P13	J. Valkovič, M. Sališová Alternatívne formy vyučovania organickej chémie na stredných školách
14:55 - 15:45	**4PP4**	J. Garaj Pozitívne a negatívne trendy v chemickom vzdelávaní
15:45 - 16:15		**Prestávka s občerstvením**
16:15 - 16:40	4P14	A. E. Pavlath Public image of chemistry

Štvrtok, 8. septembra 2005

		Predsedajúci: M. Ganajová, H. Čtrnáctová
08:30 - 08:55	4P15	J. Veřmiřovský, M. Vrkočová E-learning v diagnostické fázi VVP na základní a střední škole
08:55 - 09:45		**Panelová diskusia, záver**

Sekcia 5 - Životné prostredie, potravinárstvo a biotechnológia

Miestnosť: podľa plánu miestností na obálke (oranžový farebný kód)

Pondelok, 5. septembra 2005

14:20 - 14:30		**Úvodná informácia garantov sekcie**
		Predsedajúci: V. Koprda
14:30 - 14:55	5P01	G. Holéczyová, V. Vojteková, K. Rimárová, A. Hudák Monitoring of the element contaminants in the environmental samples
14:55 - 15:45	**5PP1**	D. Hudecová Toxinogénne huby a mykotoxíny v životnom prostredí
15:45 - 16:15		**Prestávka s občerstvením**
		Predsedajúci: F. Macášek
16:15 - 16:40	5P02	L. Svoboda Řízení environmentálních dopadů aplikace průmyslových hnojiv
16:40 - 17:05	5P03	J. Tomáš, D. Bajčan, A. Vollmannová, D. Zaujec, K. Jomová Rizikové prvky okolia Rudnian a Krompách
17:05 - 17:30	5P04	S. Bartusek, S. Brožová Plasma heating for processing the metal-bearing oxidis wastes
17:30 - 17:55	5P05	J. Kalina, V. Špunda Použití analytických metod při studiu stavu fotosyntetického aparátu pod vlivem globálních klimatických změn
20:00 - 24:00	Po	**Posterová prezentácia 1: 2Po01-2Po87, 3Po01-2Po111**

Utorok, 6. septembra 2005

		Predsedajúci: J. Kormanec
08:30 - 09:20	**5PP2**	F. Macášek Cyklotrónové iónové zväzky in vitro a in vivo
09:20 - 09:45	5P06	Z. Dvořák, R. Vrzal, J. Ulrichová CYP1A1 expresssion in primary cultures of rat hepatocytes
09:45 - 10:15		**Prestávka s občerstvením**
		Predsedajúci: Š. Schmidt
10:15 - 10:40	5P07	S. Sekretár, Š. Schmidt, L. Zahradníková Úloha obalov pri balení a skladovaní potravín
10:40 - 11:05	5P08	J. Bystrická, M. Timoracká, A. Vollmannová, S. Melicháčová, B. Škarbová Polyphenolic compounds in coloured pea seeds
11:05 - 11:30	5P09	I. Valterová, L. Cahlíková, A. Luxová, B. Kalinová O. Hovorka Samčí značkovací feromony čmeláků, jejich isolace a biosyntéza
11:30 - 11:55	5P10	T. Zoufalý, P. Brynych Český pivovárek a jeho výrobek uprostřed oceánu
20:00 - 24:00	Po	**Posterová prezentácia 2: 1Po01-1Po95, 4Po01-4Po12, 5Po01-5Po85, 6Po01-6Po12**

Streda, 7. septembra 2005

		Predsedajúci: D. Hudecová
08:30 - 08:55	5P11	P. Kafarski Derivatives of aminomethylenebisphosphonic acid - chemistry and biology
08:55 - 09:45	**5PP3**	J. Kormanec The role of sigma factors of RNA polymerase in stress response, pathogenicity and differentiation of bacteria
09:45 - 10:15		**Prestávka s občerstvením**
		Predsedajúci: J. Kormanec
10:15 - 10:40	5P12	V. Koprda Technológie pre rádioaktívne odpady a vyraďovanie jadrových zariadení
10:40 - 11:05	5P13	M. Lučaníková, J. Kučera, F. Šebesta Použitie pevných extrahentov v rádiochemickej neutrónovej aktivačnej analýze
11:05 - 11:30	5P14	P. Kotianová, H. Puxbaum n-Alkanes and polyaromatic hydrocarbons in aerosol samples
11:30 - 11:55	5P15	T. Tóth, R. Pospišil, K. Pariláková, J. Musilová, J. Bystrická Distribúcia ťažkých kovov v pôdach aplikáciou substrátu po výrobe bioplynu
12:00 - 14:30		**Obed**
		Predsedajúci: Š. Schmidt
14:30 - 14:55	5P16	J. Karovičová, Z. Kohajdová, D. Lukáčová, M. Greifová, K. Kukurová, J. Lehkoživová Fermentation of cabbage-apple juices by Lactobacillus plantarum and Bifidobacterium longum
14:55 - 15:45	**5PP4**	J. Čopíková Využití fyzikálně-chemických metod pri sledování kvality čokoládových a nečokoládových cukrovinek
15:45 - 16:15		**Prestávka s občerstvením**
		Predsedajúci: J. Čopíková
16:15 - 16:40	5P17	F. Pudil, P. Šrůta, R. Uvíra, M. Maryška, V. Janda Deriváty hydrazinu v ucháči Neuwirthovu (Gyromitra Neuwirthii)
16:40 - 17:05	5P18	A. Hegedűsová, O. Hegedűs, K. Jomová, T. Tóth, A. Vargová Zdroje selénu vo výžive obyvateľstva Nitrianskeho kraja
17:05 - 17:30	5P19	J. Musilová, R. Stanovič, J. Bystrická, L. Lahučký, P. Trebichalský Hygienický stav vybraných pôdnych predstaviteľov z hľadiska obsahu ťažkých kovov v regiónoch bez lokálneho znečistenia
17:30 - 17:55	5P20	G. Greif, M. Greifová, J. Karovičová Analysis of biogenic amines in foods and their production by some strains bacteria

Štvrtok, 8. septembra 2005

		Predsedajúci: J. Karovičová
08:30 - 08:55	5P21	A. Vollmannová, J. Tomáš, T. Tóth, M. Timoracká, B. Škarbová Zmeny obsahu vybraných flavonoidov v zelenom hrášku vo vzťahu k dobe mrazenia
08:55 - 09:20	5P22	O. Hegedűs, A. Hegedűsová, A. Vargová Stanovenie obsahu selénu viazaného v proteínovej frakcii
09:20 - 09:45	5P23	H. Parschová, Z. Matějka, K. Jurečková, P. Krotká, K. Bláha Sorpce oxoaniontů vanadu na standardním slabě bazickém anexu a sorbentu s amino-methyl-glucitolovou funkční skupinou
09:45 - 10:15		**Prestávka s občerstvením**
		Predsedajúci: V. Koprda
10:15 - 10:40	5P24	Š. Schmidt, J. Hojerová, F. Görner Minulosť a súčasnosť potravinárstva na fakulte chemickej a potravinárskej technológie
10:40-11:55		**Panelová diskusia, záver**

Sekcia 6 - CHEMPROGRESS

Miestnosť: podľa plánu miestností na obálke (zelený farebný kód)

Pondelok, 5. septembra 2005

14:20 - 14:30		**Úvodná informácia garantov sekcie**
		Predsedajúci: M. Jambrich, J. Hanika
14:30 - 14:55	6P01	P. Zámostný, L. Starkbaumová, Z. Bělohlav, T. Herink, V. Chyba, J Šimek, J. Lederer Laboratórní pyrolýza zbytkové C_9 frakce
14:55 - 15:20	6P02	M. Olšovský, P. Gášek. J. Cingelová, R. Brescher, V. Macho Vplyv kovov alkalických zemín na vulkanizáciu nenasýtených kaučukov a fyzikálno-mechanické vlastnosti vulkanizátov
15:20 - 15:45	6P03	L. Anděl, M. Šafářová, J. Kusý Fyzikálně chemický zpusob recyklace odpadního polyethylentereftalátu
15:45 - 16:15		**Prestávka s občerstvením**
		Predsedajúci: V. Macho, J. Pašek
16:15 - 17:05	**6PP1**	D. Budzák, M. Jambrich Aspekty rozvoja vláknitých materiálov vo svete a u nás
17:05 - 17:30	6P04	J. Poživil, V. Hanta Využití simulačných programu při analýze chemických procesu
17:30 - 17:55	6P05	A. E. Pavlath Alternate energy resources
20:00 - 24:00	Po	**Posterová prezentácia 1: 2Po01-2Po87, 3Po01-2Po111**

Utorok, 6. septembra 2005

		Predsedajúci: I. Novák, L. Červený
08:30 - 08:55	6P06	V. Macho, M. Králik, M. Olšovský, J. Horniaková, D. Mravec Príprava cyklických alkylénkarbonátov za miernych reakčných podmienok
08:55 - 09:20	6P07	A. Mlčoch Rozvoj anorganických pigmetu
09:20 - 09:45	6P08	L. Břenková, Z. Bělohlav, P. Durdil, J. Hanika, J. Kalčíková, V. Tomášek Optimalizace procesu mokré granulace využitím fuzzy logiky
09:45 - 10:15		**Prestávka s občerstvením**
		Predsedajúci: V. Macho, H. Kittel
10:15 - 11:05	**6PP2**	J. Pašek Několik poznámek k vývoji chemicko-technologických procesu
11:05 - 11:30	6P09	B. Cíbik, V. Macho, A. Hanzlíková Vplyv modifikácie gumovej drviny ako potenciálneho plniva gumárskych zmesí
11:30 - 11:55	6P10	M. Šimíčková, V. Tukač, V. Chyba, J. Lederer, J. Kolena, J. Šimek, J. Hanika Hydrogenace styrenu v pilotním zkrápěném reaktoru
20:00 - 24:00	Po	**Posterová prezentácia 2: 1Po01-1Po95, 4Po01-4Po12, 5Po01-5Po85, 6Po01-6Po12**

Streda, 7. septembra 2005

		Predsedajúci: M. Králik, J. Hanika
08:30 - 08:55	6P11	H. Kittel, J. Sváta Vývoj a vzájemná konkurence automobilového benzínu a motorové nafty jako rozhodujúcich paliv pro automobily
08:55 - 09:20	6P12	J. Sýkorová, M. Jambrich, A. Murárová. Ľ. Hajduchová, M. Šiarnik Štruktúra a vlastnosti bytových textílií zo zmesi nových typov vlákien
09:20 - 09:45	6P13	V. Hanta, J. Poživil Multiproduct batch processes as discrete event systems
09:45 - 10:15		**Prestávka s občerstvením**
		Predsedajúci: J. Pašek, I. Chodák
10:15 - 11:05	**6PP3**	M. Králik Perspektívy využitia výskumu v chémii
11:05 - 11:30	6P14	L. Červený Výzkum a výroba synthetických vonných látek v ČR

11:30 - 11:55	6P15	L. Starkbaumová, P. Zámostný. Z. Bělohlav Laboratórní pyrolýza naftenických uhlovodíku
12:00 - 14:30		**Obed**
		Predsedajúci: M. Šimičková, J. Lederer
14:30 - 14:55	6P16	H. Mäsiar, N. Kaloforov Neaditívne vysoký účinok veľmi malých množstiev polyetylénoxidu s molekulovou hmotnosťou 600 000 na priedušnosti a zmena ďalších technologických vlastností zlievárenských ílových formovacích zmesí
14:55 - 15:20	6P17	J. Patera, J. Krupka, K. Jirátová Příprava Pd/Al_2O_3 katalyzátoru mikoemulzní technikou
15:20 - 15:45	6P18	M. Večeřa, L. Prokůpek, L. Svoboda Polymery jako nosiče identifikačných telísek
15:45 - 16:15		**Prestávka s občerstvením**
		Predsedajúci: L. Červený
16:15 - 16:40	6P19	M. Paidar, S. Moravcová, K. Bouzek Použití Nafionové membrány modifikované vodivými polymery v palivovém článku typu PEM
16:40 - 17:05	6P20	J. Hanika Applied Research in the Institute of Chemical Process Fundamentals, Academy of Sciences of Czer Republic (ASCR), Prague

Štvrtok, 8. septembra 2005

		Predsedajúci: M. Jambrich
08:30 - 08:55	6P21	M. Polovka, J. Pigošová, K. Vizárová, S. Kirschnerová, L. Bieliková, M. Vrška The application of FTIR spectroscpy on characterization of paper samples, modified by bookkeeper process
08:55 - 09:20	6P22	P. Kuráň, J. Burdová, P. Janoš Některé aspekty analýzy těkavých halogenovaných organických látek ve vodě
09:20 - 09:45	6P23	S. Moravcová, K. Bouzek Polypyrrol vs. polyanilin jako nosič katalyzátoru v palivových článcích typu PEM katalyzátorů na bázi klastrových sloučenin boru
09:45 - 10:15		**Prestávka s občerstvením**
		Predsedajúci: V. Macho
10:15 - 10:40	6P24	M. Řičánek, A. Círová Eurosupport Manufacturing Czechia-nový hráč v oblasti výroby katalyzátorů
10:40 - 11:55		**Panelová diskusia, záver**