

69. ZJAZD CHEMIKOV

11. – 15. september 2017
Vysoké Tatry, Horný Smokovec

HLAVNÝ ORGANIZÁTOR

Slovenská chemická spoločnosť a Česká společnost chemická

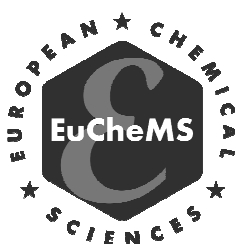


v spolupráci s

Európskou úniou pre chemické a molekulové vedy

a

Medzinárodnou úniou pre čistú a aplikovanú chémiu



ORGANIZAČNÝ VÝBOR

Mária Omastová, Viktor Milata – predsedovia

Peter Šimon, Jan John – vedeckí tajomníci

Zuzana Hloušková – hospodárka

Simona Procházková – výkonná tajomníčka

Michal Procházka, Miroslav Michalka – technickí tajomníci

PROGRAMOVÝ VÝBOR

doc. RNDr. Milan Drábik, PhD. (SChS)
RNDr. Dalma Gyepesová, CSc. (SChS)
prof. Ing. Vlasta Brezová, DrSc. (SChS)
Ing. Roman Karlubík, MBA (ZCHFP)
prof. Ing. Ivan Hudec, PhD. (SChS)
doc. RNDr. Jozef Tatiersky, PhD. (SChS)
Ing. Vladimír Mastihuba, PhD. (SCHS)
Dr.h.c. prof. Ing. Karol Florián, DrSc. (SCHS)
prof. Ing. Ján Labuda, DrSc. (STU, BA)
prof. Ing. Marián Koman, DrSc. (STU, BA)
doc. Ing. Ján Moncol', PhD. (STU, BA)
prof. Ing. Ján Híveš, PhD. (STU, BA)
Ing. Michal Korenko, PhD. (SAV, BA)
Mgr. Martin Danko, PhD. (SAV, BA)
doc. RNDr. Andrej Boháč, CSc. (UK, BA)
doc. Ing. Milan Vrška, CSc. (STU, BA)
prof. RNDr. Milan Hutta, CSc. (UK, BA)
doc. RNDr. Jozef Kuruc, CSc. (UK, BA)
prof. Mgr. Radoslav Šebesta, DrSc. (UK, BA)
prof. Ing. Štefan Schmidt, PhD. (STU, BA)
doc. Ing. Ľubomír Švorc, PhD. (STU, BA)
Ing. Ján Hirsch, DrSc. (SAV, BA)
prof. Ing. Vasil Koprda, DrSc. (STU, BA)
doc. Ing. Ján Reguli, PhD. (TU, TT)
doc. RNDr. Martin Putala, PhD. (UK, BA)
doc. RNDr. Zuzana Vargová, PhD. (UPJŠ, KE)
doc. RNDr. Katarína Reiffová, CSc. (UPJŠ, KE)
prof. RNDr. Renáta Oriňáková, CSc. (UPJŠ, KE)
prof. RNDr. Nadežda Številová, PhD. (TU, KE)
RNDr. Slávka Hamul'áková, PhD. (UPJŠ, KE)
doc. RNDr. Mária Ganajová, CSc. (UPJŠ, KE)
doc. RNDr. Magdaléna Bálintová, PhD. (TU, KE)
Ing. Elena Kulichová (Nováky)
RNDr. Helena Vicenová (Združenie učiteľov chémie)
RNDr. Beáta Vranovičová, PhD. (UCM, TT)

PROGRAM 69. ZJAZDU CHEMIKOV**Pondelok 11. 9. 2017**

- 14:00 – 18:30 Príchod účastníkov a registrácia, recepcia hotela Grand Bellevue
 19:00 – 23:00 Uvítací večierok, hotel Grand Bellevue

Utorok 12. 9. 2017

- 09:30 – 10:00 Slávnostné otvorenie zjazdu, sála hotela Grand Bellevue
 10:00 – 10:30 Príhovory zástupcov sponzorov, predstaviteľov chemických spoločností a asociácií a funkcionárov SAV a fakúlt s chemickým profilom
 10:30 – 11:30 Plenárna prednáška PLP – prof. RNDr. Pavol Šajgalík, DrSc.
 11:30 – 11:45 Pozvánka na 70. zjazd chemikov
 12:30 – 14:00 Obed, hotel Grand Bellevue
 14:00 – 14:45 Pozvaná prednáška PP1
 14:45 – 15:30 Pozvaná prednáška PP2
 16:00 – 18:30 Prednášky v sekciách
 18:30 – 20:00 Večera, hotel Grand Bellevue
 20:00 – 23:00 Posterové prezentácie, vinný večer

Streda 13. 9. 2017

- 09:00 – 09:45 Pozvaná prednáška PP3
 09:45 – 10:30 Pozvaná prednáška PP4
 10:50 – 11:20 Prednáška P1
 11:20 – 11:45 Prednáška P2
 11:45 – 12:05 Prednáška P3
 12:05 – 12:30 Prednáška P4
 12:30 – 14:00 Obed, hotel Grand Bellevue
 14:00 – 18:30 Prednášky v sekciách
 18:30 – 20:00 Večera, hotel Grand Bellevue
 20:00 – 23:00 Posterové prezentácie, pívny večer

Štvrtok 14. 9. 2017

- 09:00 – 12:30 Prednášky v sekciách
 09:00 – 12:00 Súťaž o Cenu Shimadzu
 12:30 – 14:00 Obed, hotel Grand Bellevue
 14:00 – 14:45 Pozvaná prednáška PP5
 14:45 – 15:30 Pozvaná prednáška PP6
 16:00 – 19:00 Prednášky v sekciách
 19:30 – 24:00 Slávnostný večierok s vyhodnotením súťaže o Cenu Shimadzu a posterových súťaží, sála hotela Grand Bellevue

Piatok 15. 9. 2017

- 09:30 – 10:15 Prednáška P5
 10:45 – 11:45 Panelová diskusia
 11:45 – 12:00 Záver zjazdu
 12:00 – 14:00 Obed, hotel Grand Bellevue

SEKCIE ZJAZDU A GARANTI

1. Analytická chémia

doc. Ing. Ľubomír Švorc, PhD.

2. Fyzikálna chémia

prof. Ing. Peter Šimon, DrSc.

3. Nanomateriálová chémia

Ing. Mária Omastová, DrSc.

4. Anorganická a materiálová chémia

doc. Ing. Ján Moncol, PhD.

5. Organická chémia

prof. Ing. Viktor Milata, DrSc.

6. Polyméry

Mgr. Martin Danko, PhD.

7. Jadrová chémia

doc. RNDr. Jozef Kuruc, CSc.

8. Vyučovanie a história chémie

doc. Ing. Ján Reguli, CSc.

9. Životné prostredie, potravinárstvo a biotechnológie

prof. Ing. Štefan Schmidt, PhD.

10. Chemprogress – chemické technológie

prof. Ing. Ján Híveš, PhD.

Garant súťaže posterov

prof. Ing. Štefan Schmidt, PhD.

PLENÁRNE PREDNÁŠKY

PLP	Pavol Šajgalík	Keramika na báze nitridu kremičitého – úžasná mnohorakosť jej použitia
PP1	Karel Bouzek	Konverze a skladování energie jako žhavé téma vyspělých ekonomik. A jaká je naše pozice?
PP2	Radovan Šebesta	Asymetrická organokatalýza a zelená chémia – ideálne partnestvo
PP3	Petra Šulcová	Anorganické pigmenty: od pravěku po současnost
PP4	Marián Valko	Oxidačný stres v živých systémoch indukovaný kovmi
PP5	Peter Baran	Koordináčna chémia N-oxidov aromatických amínov
PP6	Martin Rebroš	Biokatalýza – nástroj na prípravu chemikálií
P1	Igor Goljer	Identifikácia metabolitov vo farmaceutickom výskume
P2	Mariana Danková	Nové technológie pre nové výzvy (Pragolab)
P3	Monika Babíková	Anton Paar prináša inovatívne riešenia pre chemikov (Anton Paar Slovakia)
P4	Jaroslav Noskovič	Národný systém podpory transferu technológií (CVTI)
P5	Miroslav Kríž	Huby ako ich nepoznáme

OBSAH

ZOZNAM PREDNÁŠOK A POSTEROV PODĽA SEKCIÍ

Plenárna prednáška	66
PLP KERAMIKA NA BÁZE NITRIDU KREMIČITÉHO – ÚŽASNÁ MNOHORAKOSŤ JEJ POUŽITIA <u>Pavol Šajgalík</u>	66
Pozvané prednášky	66
PP1 KONVERZE A SKLADOVÁNÍ ENERGIE JAKO ŽHAVÉ TÉMA VYSPĚLÝCH EKONOMIK. A JAKÁ JE NAŠE POZICE? <u>Karel Bouzek</u>	66
PP2 ASYMETRICKÁ ORGANOKATALÝZA A ZELENÁ CHÉMIA – IDEÁLNE PARTNERSTVO <u>Radovan Šebesta</u>	67
PP3 ANORGANICKÉ PIGMENTY: OD PRAVĚKU PO SOUČASNOST <u>Petra Šulcová</u>	67
PP4 OXIDAČNÝ STRES V ŽIVÝCH SYSTÉMOCH INDUKOVANÝ KOVMI <u>Marián Valko</u>	68
PP5 KOORDINAČNÁ CHÉMIA N-OXIDOV AROMATICKÝCH AMÍNOV <u>Peter Baran</u>	68
PP6 BIOKATALÝZA - NÁSTROJ NA PRÍPRAVU CHEMIKÁLÍÍ <u>Martin Rebroš</u> , <u>Kristína Markošová</u> , <u>Vladimír Krasňan</u> , <u>Tatiana Petrovičová</u> , <u>Michal Rosenberg</u>	69
P1 IDENTIFIKÁCIA METABOLITOV VO FARMACEUTICKOM VÝSKUME <u>Igor Goljer</u>	69
P2 NOVÉ TECHNOLOGIE PRE NOVÉ VÝZVY <u>Mariana Danková</u>	70
P3 ANTON PAAR PRINÁŠA INOVATÍVNE RIEŠENIA PRE CHEMIKOV <u>Monika Babíková</u>	70
P4 OCHRANA A ZHODNOTENIE VÝSLEDKOV VÝSKUMU A VÝVOJA NA SLOVENSKU <u>Jaroslav Noskovič</u>	70
P5 HUBY AKO ICH NEPOZNÁME <u>Miroslav Kríž</u>	71

Prednášky - Sekcia 1: Analytická chémia..... 72

1P01 PERSPEKTÍVNE ELEKTROCHEMICKÉ SENZORY NA BÁZE DOPOVANÝCH DIAMANTOVÝCH ELEKTROD <u>Ľubomír Švorc</u>	72
1P02 REAKČNÁ ELEKTROANALÝZA NA ELEKTRODE Z DIAMANTU DOPOVANÉHO BÓROM: STANOVENIE CÍNU V BRONZOCH PRE KORDY PNEUMATÍK <u>Peter Tomčík</u> , Zuzana Chomisteková-Lukáčová, Eva Culková, Renata Bellová, Danica Melicherčíková.....	72
1P03 BOREM DOPOVANÉ DIAMANTOVÉ ELEKTRODY V ELEKTROANALÝZE LÉČIV <u>Renáta Šelešovská</u> , Pavlína Martinková, Michaela Štěpánková, Lenka Janíková, Jaromíra Chýlková	73
1P04 PLANAR AND POROUS NANOCRYSTALLINE BORON-DOPED DIAMOND ELECTRODES FOR ELECTROANALYSIS: COMPARISON OF SPECTRAL, MORPHOLOGICAL AND ELECTROCHEMICAL PROPERTIES <u>Karolina Schwarzová</u> , Simona Baluchová, Michal Nedvěd, Ivan Dittert, Jan Krůšek, Veronika Benson, Vincent Mortet, Andrew Taylor	73
1P05 ANALÝZA ROSTLINNÝCH STIMULÁTORŮ ELEKTROCHEMICKÝMI METODAMI <u>Jaromíra Chýlková</u> , Renáta Šelešovská, Lenka Janíková.....	74
1P06 VYUŽITÍ ELEKTROCHEMIE PRO STUDIUM MODIFIKACE PROTEINŮ REAKTIVNÍMI PRODUKTY METABOLISMU <u>David Novák</u> , Marika Svrčková, Martina Zatloukalová, Jan Vacek	74
1P07 ELECTROCHEMICAL ANALYSIS OF PRODUCTS OF TERMINAL DEOXYNUCLEOTIDYL TRANSFERASE TAILING REACTION USING INTRINSIC ELECTROACTIVITY OF NUCLEOBASES <u>Monika Hermanová</u> , Miroslav Fojta	75
1P08 CATALYSIS OF HYDROGEN EVOLUTION BY MODIFIED DNA AT MERCURY- BASED ELECTRODES AND ITS ANALYTICAL UTILIZATION <u>Miroslav Fojta</u> , Jan Špaček, Peter Šebest, Aleš Daňhel, Petr Orság, Luděk Havran	75
1P09 ENANTIOMERNÍ SEPARACE NOVÝCH SYNTETICKÝCH DROG V RŮZNÝCH CHROMATOGRAFICKÝCH MÓDECH <u>Michal Kohout</u>	76
1P10 CHIRÁLNE SEPARÁCIE KVAPALNE-KRYŠTALICKÝCH MATERIÁLOV: VÝVOJ A OPTIMALIZÁCIA SEPARAČNÝCH METÓD PRE TYČINKOVITÉ MATERIÁLY POMOCOU HPLC NA CHIRÁLNYCH STACIONÁRNÝCH FÁZACH <u>T. Vojtylová</u> , M. Cig ¹ , M. Kašpar, I. Korbecka, M. Zurowska, V. Hamplová, D. Sýkora	76
1P11 DETERMINATION OF HYDRIDE FORMING ELEMENTS BY ATOMIC ABSORPTION SPECTROMETRY <u>Alena Manová</u> , Martin Kroliak, Ernest Beinhrohr	77
1P12 PRETREATMENT STEPS IN ELEMENTAL ANALYSIS OF HAIR <u>Anna Krejčová</u> , Lenka Bendakovská, Tereza Lexová	77

1P13 VYUŽITÍ MIKRO- A NANO-TECHNOLOGIÍ PRO ANALÝZU CHEMICKÉHO OBSAHU JEDINÉ BUŇKY <u>Karel Klepárník</u>	78
---	----

Prednášky - Sekcia 2: Fyzikálna chémia 78

2P01 A MINIMAL PHYSIOLOGICALLY BASED PHARMACOKINETIC MODEL FOR NANOPARTICLES BIODISTRIBUTION <u>Tibor Dubaj</u> , Peter Šimon, Zuzana Cibulková, Anna Vykydalová	78
2P02 THERMOOXIDATIVE STABILITY OF POLYPROPYLENE/TIO ₂ AND POLYPROPYLENE/LAYERED SILICATE NANOCOMPOSITES <u>Zuzana Cibulková</u> , Anna Vykydalová, Tibor Dubaj, Peter Šimon	79
2P03 THERMOOXIDATIVE STABILITY OF ORGANIC SEMICONDUCTING MATERIALS USING NON-ISOTHERMAL DSC MEASUREMENTS <u>Anna Vykydalová</u> , Zuzana Cibulková, Tibor Dubaj, Peter Šimon	79
2P04 OD STATICKEJ THZ SPEKTROSKOPIE K THZ PUMP-PROBE EXPERIMENTU <u>Eva Noskovičová</u> , Dušan Lorenc, Dušan Velič	80
2P05 ŠTÚDIUM DYNAMIKY ABSORPCIE A FLUORESCENCIE POLYTIOFÉNOV NA PRÍPRAVU SOLÁRNYCH ČLÁNKOV <u>Lenka Slušná</u> , Ľudovít Haizer, Dimitrij Bondarev, Dušan Velič	80
2P06 IN SITU EPR AND UV–VIS–NIR SPECTROELECTROCHEMISTRY AS A UNIQUE TOOL FOR REDOX MECHANISMS STUDIES OF COORDINATION COMPOUNDS <u>Peter Rapta</u>	81
2P07 ANALYSIS OF COPPER COMPLEXES WITH BIOLOGICALLY ACTIVE LIGANDS Karina Strečanská, <u>Milan Mazúr</u>	82
2P08 REAKCIA VYLUČOVANIA VODÍKA KATALYZOVANÁ UHLÍKOVÝMI VLÁKNAMI DOPOVANÝMI KOVOVÝMI NANOČASTICAMI <u>Renáta Oriňaková</u> , Magdaléna Strečková, Mária Sabalová, Erika Múdra, Andrej Oriňak	82
2P09 REACTIONS OF COPPER (II) IN ELECTROSPRAY <u>Jana Jaklová Dytrtová</u> , Michal Jakl, Václav Kašíčka.....	83
2P10 REDUKCE ARSENIČNANŮ A ARSENITANŮ POMOCÍ NULAMOCNÉHO ŽELEZA: ÚČINNÁ STRATEGICKÉ ODSTRANĚNÍ ARSENU Z VODY <u>Jan Kolařík</u> , Robert Pucek, Jiří Tuček, Jan Filip, Martin Petr, Virender K. Sharma, Radek Zbořil	83
2P11 THE VOLUMETRIC STUDIES OF SELECTED ELECTROLYTES IN MIXTURES OF WATER WITH ALKOXYALCOHOLS <u>Zdzisław Kinart</u>	84
2P12 POKROČILÁ ANALÝZA DISOLUČNÍCH DAT <u>Daniel Švadlák</u> , Josef Chmelař, Veronika Štěpánková, Kristýna Lipenská, Vladimír Velebný	84

Prednášky - sekcia 3: Nanomateriálová chémia 85

3P01 BIOMEDICAL APPLICATION OF CARBON QUANTUM DOTS <u>Zoran Markovic</u>	85
3P02 ERADIKACE INTRACELULÁRNĚ PERZISTUJÍCÍCH BAKTERIÍ POMOCÍ NANOČÁSTIC <u>Jiří Trousil</u> , Jana Matějková, Zdeňka Syrová, Oto Pavliš, Petr Štěpánek, Martin Hrubý	85
3P03 MULTIPLEXNÍ ANALÝZA NÁDOROVÝCH MARKERŮ HER2 A EPCAM V LIDSKÉ KRVI POMOCÍ NANOKOMPOZITU $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{Ag}$ A MAGNETICKY ASISTOVANÉ POVRCHEM ZESÍLENÉ RAMANOVY SPEKTROSKOPIE (MA-SERS) <u>Anna Balzerová</u> , Ariana Fargašová, Václav Ranc, Radek Zbořil	86
3P04 ELEKTROCHEMICKÁ DETEKCIA INZULÍNU NA MIRKOELEKTRÓDACH MODIFIKOVANÝCH NANOČASTICAMI <u>Ivana Šišoláková</u> , Jana Hovancová, Renáta Oriňáková, Andrej Oriňák	86
3P05 PŘEDOPERAČNÍ DIAGNOSTIKA INFEKČÍ KLOUBNÍCH NÁHRAD METODOU MAGNETICKY ASISTOVANÉ POVRCHEM ZESÍLENÉ RAMANOVY SPEKTROSKOPIE (MA-SERS) <u>Ariana Fargašová</u> , Anna Balzerová, Robert Pucek, Miroslava Htoutou Sedláková, Kateřina Bogdanová, Jiří Gallo, Milan Kolář, Václav Ranc, Radek Zbořil.....	87
3P06 NANOROZMERNÉ STRIEBORNÉ VRSTVY V SKRÍNINGOVEJ SERS ANALÝZE ZÁVAŽNÝCH OCHORENÍ <u>Zuzana Orságová Králová</u> , Andrej Oriňák, Renáta Oriňáková, Jozef Radoňák, Lucia Lakyová, Ondrej Petruš, Erika Múdra, Oleg Shylenko	87
3P07 NANOČÁSTICE PRO DISPERZNÍ MAGNETICKOU SEPARACI <u>Jakub Koktan</u> , Ondřej Kaman, Pavel Řezanka.....	88
3P08 GRAFÉN OXIDOVÝ BIOSENZOR NA DETEKCIU ONKOLOGICKÝCH CHORENÍ <u>Nikola Bugárová</u> , Michal Bodík, Peter Šiffalovič, Matej Mičušík, Zdeno Špitálsky, Vlasta Závišová, Martina Konarecká, Miriam Zaťovičová, Silvia Pastoreková, Mária Omastová.....	88
3P09 TWO STAGE TUMOR DIAGNOSTICS BASED ON HYDROXYAPATITE NANOPARTICLES WITH POLYMER CORONA <u>Volodymyr Lobaz</u> , Zbynek Novy, Sona Gurska, Michal Sakmár, Ekaterina Kukleva, Martin Vlk, Ján Kozempel, Milos Petrik, Martin Hruby.	89
3P10 KATALYTICKÁ AKTIVITA NANOČÁSTIC KOVŮ – MODEL Y A MODELOVÉ REAKCE <u>Libor Kvítek</u> , Aleš Panáček, Robert Pucek, Šárka Hradilová, Lucie Hochvaldová, Petr Suchomel ...	89
3P11 Ni NANOKAVITOVÉ FILMY DEKOROVANÉ Ag NANOČASTICAMI PRE SERS APLIKÁCIE <u>Ondrej Petruš</u> , Andrej Oriňák, Renáta Oriňáková, Zuzana Orságová Králová, Miriam Kupková, Erika Múdra	90
3P12 SONOCHEMICKÁ PŘÍPRAVA VRSTEV ČÁSTIC STŘÍBRA NA SKLENĚNÉM PODKLADU PRO ÚČELY POVRCHEM ZESÍLENÉ RAMANOVY SPEKTROSKOPIE <u>Robert Pucek</u> , Petr Suchomel, Aleš Panáček, Linda Wagnerová, Libor Kvítek.....	91

3P13 VLIV REDOXNÍHO POTENCIÁLU REDUKČNÍ LÁTKY NA SYNTÉZU NANOČÁSTIC STŘÍBRA <u>Lucie Hochvaldová</u> , Libor Kvítek.....	91
3P14 REZISTENCE BAKTERIÍ VŮČI NANOČÁSTICÍM STŘÍBRA <u>Aleš Panáček</u> , Libor Kvítek, Monika Smékalová, Renata Večeřová, Milan Kolář, Magdalena Röderová, Marek Šebela, Robert Pucek, Radek Zbořil	92
3P15 ANTIBAKTERIÁLNÍ POVRCHOVÁ ÚPRAVA ORTOPEDICKÝCH IMPLANTÁTŮ NA BÁZI NANOČÁSTIC STŘÍBRA <u>Šárka Hradilová</u> , Aleš Panáček, Robert Pucek, Libor Kvítek, Jiří Gallo	92
3P16 VODIVÉ POLYMÉRNE NANOVLÁKNA PRIPRAVENÉ ELEKTROSTATICKÝM ZVLÁKŇOVANÍM <u>Eliška Číková</u> , Alena Šišková, Matej Mičušík, Zdenka Capáková, Michal Procházka, Mária Omastová	93
3P17 VYUŽITÍ DUTÝCH NANOČÁSTIC CaCO_3 PRO TECHNICKÉ APLIKACE <u>Jakub Vlček</u> , Lubomír Lapčík, Matthew Ruzsala	93
3P18 FLUORINATION OF NAPHTHALENEDIIMIDE-BENZOTHIADIAZOLE-BASED DUAL-ACCEPTOR COPOLYMERS FOR AMBIPOLAR FIELD-EFFECT TRANSISTORS <u>Hanna Makowska</u> , Cunbin An, Tomasz Marszalek, Wojciech Pisula, Martin Baumgarten	94

Prednášky - sekcia 4: Anorganická a materiálová chémia..... 94

4P01 ON THE ATTRACTIVITY OF BENTONITES AND CLAY MINERALS FOR THE CHEMISTS <u>Peter Komadel</u> , Lukáš Petra	94
4P02 FYZIKÁLNÍ A CHEMICKÁ PODSTATA MIKRO A NANOSTRUKTUROVÁNÍ CHALKOGENIDOVÝCH SKEL <u>Miroslav Vlcek</u> , Karel Palka, Stanislav Slang, Liudmila Loghina, Jan Buzek, Anastasia Iakovleva ...	95
4P03 XPS AND NMR SPECTROSCOPY OF TERNARY FLUORIDES <u>Miroslav Boča</u>	95
4P04 SOLAR THERMAL ELECTROLYTIC PRODUCTION OF MAGNESIUM FROM MOLTEN FLUORIDES: ELECTROCHEMICAL REACTION KINETICS, MASS TRANSPORT AND REFLECTIONS ON COMMERCIAL VIABILITY R. Palumbo, <u>M. Korenko</u> , N. Leonard, L.J. Venstrom, S. Nudehi, R. Diver, C. Larson, K. Blood, P.T. Kissinger.....	96
4P05 COMPARISON OF PHYSICO-CHEMICAL PROPERTIES OF MOLTEN SYSTEMS BASED ON LANTHANUM FLUORIDE <u>Blanka Kubíková</u> , Jarmila Mlynáriková, Eva Mikšíková, Z. Netriová, M. Šimurda, M. Boča	96
4P06 MAKROCYKlickÉ LIGANDY AKO CHELÁTORY ŤAŽKÝCH KOVOV Miroslava Litecká, <u>Zuzana Vargová</u> , Róbert Gyepes, Miroslav Almáši, Mária Vilková.....	97

4P07 STRUCTURES, EPR SPECTRA AND MAGNETISM OF TRANSITION METAL DIPICOLINATES WITH N-DONOR LIGANDS <u>Petra Masárová</u> , Vladimír Kuchtanin, Milan Mazúr, Ján Moncol	98
---	----

4P08 STRUCTURALLY DIVERSE MANGANESE(III)-SALEN COMPLEXES WITH BRIDGING FORMATE LIGAND <u>Jan Moncol</u> , Martin Schoeller, Mario Izakovič	98
--	----

Prednášky - sekcia 5 Organická chémia..... 99

5P01 POTENTIAL CHROMOGENIC SUBSTRATE FOR GH30 GLUCURONOXYLANASES – A TOTAL SYNTHESIS <u>Marek Baráth</u> , Ján Hirsch, Vladimír Puchart, Peter Biely.....	99
---	----

5P02 KRYŠTALIZÁCIOU-INDUKOVANÁ ASYMETRICKÁ TRANSFORMÁCIA - MODERNÝ NÁSTROJ ORGANICKEJ SYNTÉZY <u>Pavol Jakubec</u> , Eva Puchľová, Dušan Berkeš	99
---	----

5P03 EFEKTÍVNA SYNTÉZA FUNKCIONALIZOVANÝCH PYROLIDÍNŮV <u>Eva Puchľová</u> , Jozef Markus, Dušan Berkeš	100
--	-----

5P04 ENANTIOSELEKTIVNÍ KATALYZÁTORY ZAKOTVENÉ NA PERLOVÝCH KOPOLYMEREC STYRENU <u>Miloš Sedlák</u>	101
--	-----

5P05 MĚDNATÉ KOMPLEXY 2-(PYRIDIN-2-YL)IMIDAZOLIDIN-4-THIONŮ JAKO ENANTIOSELEKTIVNÍ KATALYZÁTORY PRO HENRYHO REAKCI <u>Gabriela Nováková</u> , Pavel Drabina, Miloš Sedlák	101
---	-----

5P06 PYRAZINACENES AND OXOPORPHYRINOGENS <u>Jonathan P. Hill</u> , David Miklík, Matsushita, Jan Labuta, Katsuhiko Ariga.....	102
--	-----

5P07 2,5-DIARYL-4-HYDROXY-1,3-THIAZOLY S FLUORESCENČNÍMI VLASTNOSTMI <u>Jiří Hanusek</u> , Richard Kammel, Denisa Tarabová, Miloš Nepraš	102
---	-----

5P08 MAGNETICKÉ NANOČÁSTICE STABILIZOVANÉ V KAPALNĚ-KRYSTALICKÝCH MATRICÍCH <u>Anna Poryvai</u> , Michal Kohout, Vladimíra Novotná, Jiří Svoboda.....	103
---	-----

5P09 FOTOCHÉMICKÁ KONTROLA UVOĽŇOVANIA, RESP. VIAZANIA KATIÓNŮV KOVŮV Z KOMPLEXOV DIARYLHYDRAZÓNŮV <u>Pavol Tisovský</u> , Miroslav Horváth, Jana Donovalová, Anton Gáplovský	103
---	-----

Prednášky - sekcia 6 Polyméry 104

6P01 SUPRAMOLEKULÁRNÍ SAMOUSPOŘÁDANÉ POLYMERNÍ SYSTÉMY PRO DIAGNOSTIKU A TERAPII <u>Martin Hrubý</u> , Lenka Loukotová, Jan Kučka, Maria Rabyk, Jiří Trousil, Tomáš Urbánek, Jiří Pánek, Volodymyr Lobaz, Kristýna Kolouchová, Pavel Švec, Miroslav Vetrík, Lucie Kománková, Ondřej Sedláček, Petr Štěpánek	104
---	-----

6P02 CATIONIC POLY(2-OXAZOLINES) FOR GENE DELIVERY Maroš Smolíček, Zuzana Kroneková, Emi Haladjova, Stanislav Rangelov, <u>Juraj Kronek</u>	104
6P03 IMUNORADIOTERAPEUTICKÝ HYBRIDNÍ POLYMERNÍ SYSTÉM Lenka Loukotová, <u>Jan Kučka</u> , Martin Hrubý, Maria Rabyk, Pavla Francová, Věra Kolářová, Petr Páral, Tomáš Heizer, <u>Luděk Šefc</u>	105
6P04 VÝVOJ NOVÝCH TYPŮ DERIVÁTŮ KYSELINY HYALURONOVÉ S AKTIVNÍ LÁTKOU POUŽÍVANÉ PRO PŘÍPRAVU VLÁKEN <u>Jana Baťová</u> , Tomáš Pitucha, Jiří Běťák, Kateřina Knotková, Martin Pravda, Vladimír Velebný	106
6P05 BONDING PROPERTIES OF ACRYLNITRIL BUTADIENE RUBBER WITH POLYAMIDE MEDIATED BY A FUNCTIONAL LAYER OF SILANE COUPLING AGENT <u>Jing Sang</u> , Sumio Aisawa, Hidetoshi Hirahara, Kunio Mori.....	106
6P06 VÝSKUM VPLYVU NÍZKOTEPLOTNEJ PLAZMY NA ZVÝŠENIE PERMANENTNOSTI POVRCHOVEJ ÚPRAVY TEXTILNÝCH MATERIÁLOV S POUŽITÍM NANOSÓLOV <u>Zdenko Špitalský</u> , Mária Kováčová, Ondrej Žigo, Igor Novák, Angela Kleinová, Matej Mičušík, Zuzana Nógellová, Dana Rástočná Illová	107
6P07 POLYMERNÍ SYSTÉMY MODIFIKOVANÉ UHLÍKOVÝMI NANODESTIČKAMI <u>Ivan Kelnar</u> , Ludmila Kaprálková.....	107
6P08 POLYMÉRNE KOMPOZITY PRE 3D TLAČ <u>Zdenko Špitalský</u> , Janka Kozakovičová, Mária Kováčová, Michal Procházka, Ondrej Žigo, Katarína Csomorová, Marek Vysopal	107
6P09 ZMES GLYCERÍNU A MOČOVINY AKO ZMÄKČOVADLO NA PŘÍPRAVU TERMOPLASTICKÉHO ŠKROBU <u>František Ivanič</u> , Ivan Chodák	108
6P10 CONFOCAL RAMAN MICROSCOPY OF HYDROGEL MICROSPHERES <u>Zuzana Kroneková</u> , Michal Pelach, Petra Mazancová, Lucia Uhelská, Dušana Treľová, Filip Rázga, Veronika Némethová, Vladimír Raus, James J. McGarrigle, José Oberholzer, Peter Šiffalovič, Igor Lacík	108
6P11 AUTOFLUORESCENCE OF ANTHRACYCLINES OBSERVED BY FLIM <u>Jiří Pánek</u> , Olga Janoušková, Ondřej Sedláček, Martin Hrubý, Petr Štěpánek	109
6P12 STRUCTURE OF LINEAR AND RING MACROMOLECULES CONFINED IN ARRAY OF NANOPOSTS Zuzana Benková, Lucia Rišpanová, <u>Peter Cifra</u>	110
6P13 FUNCTIONAL POLYESTERS FROM TULIPALINE A AND ϵ -CAPROLACTONE. <u>Matin Danko</u> , Slávka Ďurkáčová, Jaroslav Mosnáček	110
6P14 ČÁSTICE POLY(ϵ -KAPROLAKTON-CO- γ -BUTYROLAKTON)U PRO MEDICÍNSKÉ POUŽITÍ <u>Tomáš Urbánek</u> , Jiří Trousil, Peter Černoč, Soňa Hermanová, Martin Hrubý.....	111

6P15 POLY(E-CAPROLACTONE)-CLAY NANOCOMPOSITES <u>Michaela Sedničková</u> , Daniela Joheć Mošková, Ivica Janigová, Juraj Kronek, Luboš Jankovič, Miroslav Šlouf, Ivan Chodák	111
---	-----

6P16 USPOŘÁDANÉ ALIFATICKÉ POLYURETHANOVÉ ELASTOMERY JAKO MATRICE PRO INTELIGENTNÍ SAMOREGENERUJÍCÍ SE MATERIÁLY <u>Milena Špírková</u> , Libor Matějka	112
---	-----

Prednášky - sekcia 7 Jadrová chémia 112

7P01 SKÚSENOSTI Z VÝROBY RÁDIOFARMÁK NA SLOVENSKU <u>Pavol Rajec</u>	112
---	-----

7P02 MONITOROVANIE ENERGIE A PRÚDU PROTÓNOVÉHO ZVÄZKU AKTIVÁCIOU TITÁNOVÝCH A MEDENÝCH FÓLIÍ <u>Jaroslav Červenák</u> , Ondřej Lebeda.....	112
--	-----

7P03 ACTINIDS / LANTHANIDS SEPARATIONS BY NOVEL BTBP/BTPPhen EXTRACTANTS Petr Distler, <u>Jan John</u>	113
--	-----

7P04 RÝCHLE STANOVENIE ⁷⁹ Se POMOCO K VAPALINOVEJ SCINTILAČNEJ SPEKTROMETRIE <u>Silvia Dulanská</u> , Biana Horváthová, Boris Remenec, Ľubomír Máteľ.....	113
--	-----

7P05 KOMPOZITNÉ SORBENTY S OXIDOM MANGÁNU PRE ZAKONCENTROVANIE ALFA RÁDIONUKLIDOV Silvia Dulanská, <u>Ľubomír Máteľ</u>	114
---	-----

7P06 STANOVENIE SAMÁRIA-151 METÓDOU EXTRAČNEJ CHROMATOGRFIE <u>Jana Strišovská</u> , Dušan Galanda, Dominika Tatárová.....	114
---	-----

7P07 SLEDOVÁNÍ VYBRANÝCH PARAMETRŮ PŘI OZAŘOVÁNÍ BUNĚK IONIZUJÍCÍM ZÁŘENÍM <u>Lukáš Ondrák</u> , Viliam Múčka.....	115
--	-----

7P08 FYKOREMEDIÁCIA AKO POTENCIÁLNA METÓDA DEKONTAMINÁCIE VÔD <u>Dominika Tatarová</u> , Dušan Galanda, Jozef Kuruc	115
--	-----

7P09 HIGH-ENERGY CHEMISTRY - INTERDISCIPLINARY SCIENCE. PRESENT STATE AND PERSPECTIVES OF DEVELOPMENT IN THE SLOVAK REPUBLIC AND THE CZECH REPUBLIC <u>Jozef Kuruc</u>	116
---	-----

Prednášky - sekcia 8 Vyučovanie a história chémie..... 116

8P01 MIKROEXPERIMENTY PRO PŘEDNÁŠKY <u>Vilém Bartůněk</u> , Ondřej Jankovský, David Sedmidubský	116
--	-----

8P02 OBSAH VÝUKY CHEMIE NA ÚROVNI ISCED 2 & 3 VE 21. STOLETÍ <u>Hana Čtrnáctová</u> , Mária Ganajová	117
---	-----

8P03 CHEMICKÉ UČEBNÉ ÚLOHY PRE ROZVOJ SPÔSOBILOSTÍ ŽIAKOV <u>Mária Ganajová</u> , Hana Čtrnáctová, Ivana Sotáková, Mária Siváková	117
8P04 POTRAVINY POHLEDEM CHEMIKA – KURZ PRO POSLUCHAČE UNIVERZITY TŘETÍHO VĚKU <u>Jana Prášilová</u>	118
8P05 HODINY CHÉMIE AKO MIESTO BOJA PROTI KONŠPIRÁCIÁM A HOAXOM <u>Ján Reguli</u>	118
8P06 PODPORA PŘÍRODOVĚDNÉHO VZDĚLÁVÁNÍ NAKATEDŘE CHEMIE FPE ZČU <u>Jitka Štrofová</u> , Vladimír Sirotek.....	119
8P07 SPOMIENKA NA PROFESORA MIKULÁŠA FURDÍKA (1905 – 1967) <u>Ján Čaplovič</u>	119
8P08 HISTÓRIA POTRAVINÁRSKEHO PRIEMYSLU NA SLOVENSKU <u>Michal Uher</u> , Ľudovít Hallon, Kamil Cejpek, Viktor Milata	120

Prednášky - sekcia 9 Životné prostredie, potravinárstvo a biotechnológie..... 121
--

9P01 FAJČÍŠ, PIJEŠ, DROGUJEŠ? ČO VIEME ZISTIŤ O VÁS Z ODPADOVÝCH VÔD <u>Igor Bodík</u> , Tomáš Mackuľak	121
9P02 ČIŠTĚNÍ ODPADNÍCH VOD Z VÝROBY PIGMENTU YELLOW 183 <u>Libor Dušek</u> , Tomáš Weidlich	121
9P03 RADIKÁLY V KATALÝZE RESPIRAČNÝCH OXIDÁZ Katarina Kopčová, Daniel Jancura, <u>Marián Fabián</u>	122
9P04 ENZÝMOVÁ PRÍPRAVA PRÍRODNÝCH FENYLETANOIDNÝCH GLYKOZIDOV A ICH ANALÓGOV Elena Karnišová Potocká, Mária Mastihubová, Peter Kis, <u>Vladimír Mastihuba</u>	122
9P05 VYUŽITIE MIKROORGANIZMOV PRI ODBÚRAVANÍ TYRAMÍNU V MODELOVÝCH PODMIENKACH <u>Patrik Body</u> , Gabriel Greif, Denisa Škodáčková, Dominika Horná, Mária Greifová	123
9P06 ANTIOXIDAČNÍ KAPACITA NEROZPUSTNÝCH PODÍLŮ POTRAVIN ROSTLINNÉHO PŮVODU <u>Karel Cejpek</u> , Kateřina Formánková.....	123
9P07 RAKYTNÍK REŠETLIÁKOVÝ – VÝZNAMNÝ ZDROJ VOĽNÝCH AMINOKYSELÍN <u>Zuzana Ciesarová</u> , Kristína Kukurová, Viera Jelemenská, Martina Benčíková, Mária Kopuncová, Jana Horváthová.....	124
9P08 RAKYTNÍK REŠETLIÁKOVÝ AKO ZDROJ BIOLOGICKY AKTÍVNYCH LÁTOK <u>Zuzana Burčová</u> , František Kreps, Štefan Schmidt, Stanislav Sekretár	124

9P09 HODNOTENIE ZDRAVOTNEJ BEZPEČNOSTI VÝROBKOV S OBSAHOM RAKYTNÍKA Z HĽADISKA VZNIKU PROCESNÝCH KONTAMINANTOV <u>Kristína Kukurová</u> , Zuzana Ciesarová, Viera Jelemenská, Martina Benčíčová, Mária Kopuncová, Jana Horváthová, Ľubomír Daško	125
9P10 BRUSNICE AKO ZDROJ ZDRAVIU PROSPEŠNÝCH LÁTOK <u>Eva Hybenová</u> , Anna Mikulajová, Lukáš Žemlička, Monika Slováková	125
9P11 BILANCIA PRÍJMU NUTRIENTOV V STRAVE ČLOVEKA <u>Stanislav Sekretár</u> , Zuzana Burčová, František Kreps, Štefan Schmidt	126
9P12 VOĽNÉ RADIKÁLY A OXIDAČNÝ STRES <i>VERSUS</i> OCHRANNÉ ANTIOXIDANTY – NOVÉ PREKVAPUJÚCE ZISTENIA. <u>J. Čársky</u>	126
9P13 BIOLOGICKY VÝZNAMNÉ LÁTKY KÔRY SMREKA OBYČAJNÉHO <u>František Kreps</u> , Zuzana Burčová, Štefan Schmidt, Stanislav Sekretár	127
9P14 FENOLY A POLYFENOLY V POTRAVINÁCH A ICH ANTIOXIDAČNÁ AKTIVITA A ZDRAVOTNÁ PROSPEŠNOSŤ <u>Štefan Schmidt</u> , Zuzana Burčová, František Kreps, Stanislav Sekretár, Igor Šurina, Aleš Ház, Michal Jablonský	127

Prednášky - sekcia 10 Chemprogress - chemické technológie .. 128

10P01 VLIV POUŽITÉHO UŠLECHTILÉHO KOVU VE SLITINĚ HLINÍK-KOV NA PRŮBĚH DEHALOGENACE AROMATICKÝCH HALOGENERIVÁTŮ V ALKALICKÉM VODNÉM ROZTOKU <u>Tomáš Weidlich</u>	128
10P02 KINETIKA KONVERZNEJ REAKCIE ENERGOSADROVCA <u>Jana Jurišová</u> , Vladimír Danielik, Pavel Fellner, Milan Králík	129
10P03 VLIV KRÁTKÝCH KONTROLOVANÝCH ZKRATŮ NA JEDNOTLIVÉ FÁZE PROVOZU PEM PALIVOVÉHO ČLÁNKU <u>Jakub Mališ</u> , Martin Paidar, Karel Bouzek	129
10P04 ELEKTRICKÁ VODIVOST NÍZKOTEPLNOTNÝCH KRYOLITOVÝCH TAVENÍN <u>Emília Kubiňáková</u> , Vladimír Danielik, Ján Híveš	130
10P05 PROGRES V ELEKTROCHEMICKÉJ PRÍPRAVE ŽELEZANOV <u>Ján Híveš</u> , Kamil Kerekeš, Emília Kubiňáková	130
10P06 BIOTLAČ BIOSYNTETICKÝCH TUBULÁRNYCH SUBSTITUENTOV POŠKODENEJ ĽUDSKEJ MOČOVEJ RŮRY <u>Dušan Bakoš</u> , Ida Vašková, Viera Jančovičová, Michal Čeppan	131

Prednášky Cena Shimadzu..... 132

Sh01 UTILIZATION OF FAST SCAN DIFFERENTIAL PULSE VOLTAMMETRY AND FLOW SYSTEMS FOR DETERMINATION OF ANTIOXIDANTS <u>Dmytro Bovol</u> , Hana Dejmekova, Jiri Zima, and Jiri Barek	132
---	-----

Sh02 ELEKTROCHEMICKÉ STANOVENIE GLUKÓZY NA ZLATÝCH MIKROELEKTRÓDACH <u>Jana Hovancová</u> , Ivana Šišoláková, Renáta Oriňaková, Andrej Oriňak	133
Sh03 BIOPROSPEKCE ROSTLIN <i>CANNABIS SATIVA</i> , VÝVOJ METODY METABOLOMICKÉHO FINGERPRINTINGU PRO SELEKCI ODRŮD <u>Jiří Hricko</u> , Alena Zachariášová, Milena Stránská	133
Sh04 FOSFOPROTEOMICKÁ ANALÝZA PROCESOV RÁDIOSENZIBILIZÁCIE NÁDOROVEJ LÍNIE NEMALOBUNKOVÉHO KARCINÓMU PĽÚC OVPLYVNENEJ INHIBÍTOROM AUTOFÁGIE LYS05 <u>Martin Ondrej</u> , Lucie Čecháková, Ivo Fabrik, Barbora Šalovská, Aleš Tichý	134
Sh05 VYUŽITIE HPLC-MALDI TOF/TOF ANALÝZY DERIVATIZOVANÝCH GLYKÁNOV V DIAGNOSTIKE PORÚCH METABOLIZMU GLYKOKONJUGÁTOV <u>Zuzana Pakanová</u> , Peter Baráth, Jana Ziburová, Marek Nemčovič, Sergej Šesták, Mária Matulová, Ján Mucha	134
Sh06 AMBIENTNÍ HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIE: POVRCHOVÁ ANALÝZA OD PLANÁRNÍCH VZORKŮ K NEPLANÁRNÍM <u>Jan Rejšek</u> , Vladimír Vrkoslav, Josef Cvačka.....	135
Sh07 ANALÝZA A IDENTIFIKÁCIA 5-FLUOROCYTOZÍNU A JEHO METABOLITOV V KOMPLEXNÝCH BIOLOGICKÝCH MATRICIACH S VYUŽITÍM HPLC-HRMS <u>Pavel Škvára</u> , Monika Radičová, Nikoleta Biherczová, Miroslava Matúšková, Erika Ďuriníková, Andrea Vojs Staňová.....	135
Sh08 SELEKTIVNÍ IZOLACE HYDROFOBINU SC3 A JEHO NÁSLEDNÁ PROTEOMICKÁ ANALÝZA <u>Miroslava Zelená</u> , Rudolf Kupčík, Pavel Řehulka, Zuzana Bílková, Lenka Česlová	136
Sh09 VOĽBA PARAMETROV KOMBINOVANEJ QUECHERS S DISPERZNOU MIKROEXTRAKCIOU V SYSTÉME KVAPALINA-KVAPALINA (DLLME) NA IZOLÁCIU REZÍDUÍ PESTICÍDOV Z BAVLNENÝCH PRODUKTOV <u>Silvia Zichová</u> , Dušan Palacka, Svetlana Hrouzková.....	136

Postery - sekcia 1 Analytická chémia 137

1Po01 MATRIX ASSISTED AND/OR LASER DESORPTION IONISATION QUADRUPOLE ION TRAP TIME-OF-FLIGHT MASS SPECTROMETRY OF WO ₃ CLUSTERS FORMATION IN GAS PHASE. NANODIAMONDS AND GRAPHENE OXIDE MATRICES <u>Mayuri Ausekar</u> , Ravi Mawale, Pavel Pazdera, Josef Havel	137
1Po02 STÁRNUTÍ ROZTOKU CHLORIDU BARNATÉHO A JEHO VLIV NA TURBIDIMETRICKÉ STANOVENÍ SÍRANŮ <u>Kateřina Bednářová</u> , Ivona Sedlářová, Jan Vídenský	138
1Po03 SPEKTRO-ELEKTROCHEMICKÉ VLASTNOSTI NANOSTRUKTUROVANÉHO STŘÍBRNÉHO AMALGÁMU ELEKTRODEPONOVANÉHO NA ITO <u>Aleš Daňhel</u> , Peter Šebest, Pavlína Vidláková, Filip Ligmajer	138

1Po04 DETERMINATION OF HOMOGENEITY OF ACID USING HPLC WITH AMPEROMETRIC DETECTION ON GLASSY CARBON PASTE ELECTRODE <u>Hana Dejmková</u> , Maria Lozano, Jiří Zima	139
1Po05 STANOVENÍ SPEKTRA MASTNÝCH KYSELIN V TUKOVÉ TKÁNI VEGANŮ A OMNIVORŮ POMOCÍ PLYNOVÉ CHROMATOGRAFIE. <u>Martin Jaček</u> , Jan Gojda, Lenka Rossmeislová, Petr Tůma	139
1Po06 MASS SPECTROMETRY OF GRAPHENE AND GRAPHENE OXIDE <u>Lenka Kolářová</u> , Ravi Mawale, Pavel Pazdera, Josef Havel.....	140
1Po07 ZAVEDENÍ METODIKY IZOLACE RNA Z CD14+ MONONUKLEÁRNÍCH BUNĚK A JEJÍ REVERZNÍ TRANSKRIPCE A AMPLIFIKACE METODOU PCR. <u>Karolína Křenková</u> , Michal Haluzík	141
1Po08 APPLICATION OF PROTECTIVE POLYMERS FOR FRAGMENTATION REDUCTION IN COURSE OF LASER DESORPTION IONIZATION EXPLOITED FOR MASS SPECTROMETRY CHARACTERIZATION OF CHALCOGENIDE GLASSES <u>Ravi Mawale</u> , Petr Němec, Josef Havel	141
1Po09 ANALYSIS OF ZINC IN THE <i>ENCHYTRAEUS CRYPTICUS</i> ORGANISM <u>Jan Patočka</u> , Klára Stojarová, Kateřina Hrdá, Anna Krejčová, Miloslav Pouzar	142
1Po10 DETERMINATION OF TIN TRACES IN WATER SAMPLES BY ADSORPTIVE STRIPPING VOLTAMMETRY <u>Przemysław Piątek</u> , Małgorzata Grabarczyk.....	142
1Po11 VYUŽITIE TECHNIKY DÁVKOVANIA JEMNEJ SUSPENZIE S ATÓMOVOU ABSORPČNOU SPEKTROMETRIOU S ELEKTROTERMICKOU ATOMIZÁCIU NA STANOVENIE A ŠPECIÁCIU CHRÓMU Z VODNÝCH VZORIEK <u>Simona Procházková</u> , Katarína Kriegerová, Radoslav Halko	143
1Po12 THE THERMODYNAMIC AND KINETIC PROPERTIES OF LEAD(II) COMPLEXES WITH TETRA-AZAMACROCYCLIC LIGANDS <u>Viktorie Reichová</u> , Přemysl Lubal, Petr Hermann	143
1Po13 SEPARACE LÁTEK OBSAHUJÍCÍCH FOSFÁTOVOU SKUPINU KAPILÁRNÍ ELEKTROFORÉZOU S VYUŽITÍM NOVĚ PŘIPRAVENÉHO LIGANDU NA BÁZI PYRIDNU <u>Pavel Řezanka</u> , Martina Hegrová, Kamil Záruba.....	144
1Po14 ELEKTROCHEMICKÉ VYLUČOVANIE STRIEBORNÉHO AMALGÁMU NA ELEKTRODÁCH Z PYROLYTICKÉHO UHLÍKU <u>Peter Šebest</u> , Pavlína Vidláková, Filip Ligmajer, Aleš Daňhel.....	144
1Po15 FLOW TECHNIQUES - TOOL FOR RESEARCH IN PHARMACEUTICAL AREA <u>Petr Solich</u> , Hana Sklenářová, Petr Chocholouš	145
1Po16 KARBAMÁTY JAKO ÚČINNÉ INHIBITORY CHOLINESTERÁZ <u>Šárka Štěpánková</u> , Katarína Vorčáková	145

1Po17 STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF TWO INTERMEDIATE BIOSYNTHETIC PRODUCTS OF ANGUCYCLINE ANTIBIOTIC AURICIN FROM STREPTOMYCES AUREOFACIENS CCM 3239 <u>Iveta Uhliariková</u> , Mária Matulová, Vladimír Pätoprstý, Ján Kormanec	146
1Po18 BIOLOGICAL ACTIVITY, STRUCTURAL CHARACTERIZATION AND CRYSTAL PACKING OF THE INDOLIZINE DERIVATIVES <u>Viktor Vrábel</u> , Július Sivý, Peter Šafař, Štefan Marchalín	146
1Po19 ŠTÚDIUM ANALYTICKÝCH VLASTNOSTÍ LIEČIVA AMPRÓLIUM A JEHO STANOVENIE V KRMIVÁCH <u>Jozef Sokol</u> , Mária Maliarová, Katarína Kulichová	147

Postery - sekcia 2 Fyzikálna chémia 148

2Po01 ELECTROCHEMISTRY AND SPECTROCHEMISTRY OF TRIGONAL-BIPYRAMIDAL MANGANESE(III) COMPLEX WITH A SALEN TYPE LIGAND <u>Denisa Darvasiová</u> , Peter Rapta, Lukáš Bučinský, Martin Breza, Vladimír B. Arion	148
2Po02 FORENZNÁ KONCEPCIA HMOTNOSTNEJ SPEKTROMETRIE SEKUNDÁRNYCH IÓNOV PRI VYTVÁRANÍ DATABÁZY AUTOLAKOV <u>Lea Hegedüsová</u> , Monika Jerigová, Dušan Velič	148
2Po03 EPR CHARACTERISATION OF COPPER(II) THIOSEMICARBAZONE COMPLEXES <u>Michal Hricovíni</u> , Milan Mazúr, Vlasta Brezová, Vladimír B. Arion.....	149
2Po04 THEORETICAL AND EXPERIMENTAL ANALYSIS OF HEPARIN PENTASACCHARIDE Miloš Hricovíni	149
2Po05 STUDIUM HYDROFOBICITY VYBRANÝCH FLAVONOLIGNANŮ METODOU VYSOKOÚČINNÉ KAPALINOVÉ CHROMATOGRAFIE <u>Pavel Kosina</u> , Alena Rajnochová Svobodová, Jitka Vostálová, David Biedermann, Jitka Ulrichová	150
2Po06 ABSORPČNÁ SPEKTROSKOPIA FENOKOLOVÝCH ŽIVÍC <u>Eva Noskovičová</u> , Dušan Lorenc, Dušan Velič	150
2Po07 NEKATALYZOVANÝ BROMIČNANOVÝ OSCILÁTOR S 8-HYDROXYCHINOLÍNOM AKO SUBSTRÁTOM <u>Marek Pribus</u> , Ivan Valent	151
2Po08 VYUŽITÍ METOD RTUŤOVÉ POROZIMETRIE A FYZIKÁLNÍ SORPCE DUSÍKU PRO CHARAKTERIZACI PÓROVÉHO PROSTORU VYBRANÝCH PÍSKOVČŮ <u>Lucie Ruppenthalová</u> , Martin Vavro.....	151
2Po09 NANOMATERIALS AND THEIR TOXICITY <u>Peter Šimon</u> , Tibor Dubaj, Zuzana Cibulková, Anna Vykydalová	152
2Po10 FLUORESCENČNÁ CHARAKTERIZÁCIA LIGNÍNU A FENOKOLOVÝCH ŽIVÍC <u>Lenka Slušná</u> , Dušan Velič	152

Postery - sekcia 3 Nanomateriálová chémia 153

- 3Po01 METODIKA VERIFIKACE MULTIMODÁLNI KONTRASTNÍ LÁTKY NA BÁZI
MAGNETICKÝCH NANOČÁSTIC PRO ZOBRAZOVACÍ MODALITY MPI-MRI-
FLUORESCENCE
Pavla Francová, Kateřina Poláková, Viktor Sýkora, Martin Šácha, Luděk Šefc 153
- 3Po02 POLYSTYRENOVÉ NANOČÁSTICE S PORFYRINOVÝMY FOTOSENSITIZERY:
FOTOOXIDAČNÍ VLASTNOSTI A DETEKCE KYSLÍKU
Petr Henke, Pavel Kubát, Jiří Mosinger 153
- 3Po03 NATURAL PRODUCTS BASED THERAPEUTICS
Z. Hlouskova, P. Capek, A. Dvurečenskij, I. Capek 154
- 3Po04 PRÍPRAVA NANOČASTÍČ PRE DETEKCIU PLYNNÝCH BIOMARKEROV CHORÔB
Ana Hološ, Jozef Kollár, Ján Ivančo, Jaroslav Mosnáček 155
- 3Po05 NANOSTRUKTUROVANÉ POVRCHY POLYMERŮ PRO RŮZNÉ APLIKACE
Zdeňka Kolská, Tereza Knapová, Monika Benkocká, Viktorie Neubertová, Kateřina Kolářová,
Václav Švorčík 155
- 3Po06 VERIFICATION OF NOVEL MAGNETIC NANOPARTICLES AS A CONTRAST
MEDIA FOR MRI-CT/SPECT IMAGING
Uliana Kostiv, Blanka Laudová, Volodymyr Lobaz, Jan Kučka, Pavla Franová, Martin Hrubý,
Daniel Horák, Luděk Šefc 156
- 3Po07 PRÍPRAVA NANOČASTÍČ UŠLECHTILÝCH KOVŮ POMOCÍ PŘÍMÉHO
NAPRAŠOVÁNÍ
Markéta Pišlová, Zdeňka Novotná, Petr Slepíčka, Zdeňka Kolská, Václav Švorčík 156
- 3Po08 KOVOVÉ NANODRÁTKY NA POLYETHYLENNAFTALÁTU PRO BIOAPLIKACE:
PŘÍPRAVA, CHARAKTERIZACE, ANTIBAKTERIÁLNÍ A CYTOTOXICKÉ
ÚČINKY
Markéta Polívková, Marek Staszek, Jakub Siegel, Václav Švorčík 157
- 3Po09 SILVER NANOPARTICLE DECORATED PET: EFFECT OF LASER
IMMOBILIZATION
Jakub Siegel, Marek Staszek, Markéta Polívková, Václav Švorčík 157
- 3Po10 LUMINISCENCE TENKÝCH VRSTEV CHALKOGENIDOVÉHO SKLA $\text{Ge}_{25}\text{S}_{75}$
DOPOVANÝCH NANOČÁSTICEMI Cd-S-Se
Stanislav Šlang, Liudmila Loghina, Karel Pálka, Miroslav Vlček 158

Postery - sekcia 4 Anorganická a materiálová chémia 159

- 4Po01 INTERAKCE STRUSEK S TĚŽKÝMI KOVY
Lenka Bláhová, Zuzana Navrátilová 159
- 4Po02 SROVNÁVÁNÍ POVRCHOVÝCH VLASTNOSTÍ CIHELNÝCH OBRUSŮ Z
HLEDISKA FIXACE TOXICKÝCH IONTŮ
Eliška Duchková, Barbora Doušová, Miloslav Lhotka, Petr Mikysek, David Koloušek 159

4Po03 PROCESY VEDÚCE K OBOHATENIU PRÍRODNEJ IZOTOPOVEJ ZMESI VANÁDU <u>Michal Galamboš</u> , Lukáš Krivosudský	160
4Po04 3-D PRINTING AS TECHNIQUE FOR THE PRODUCTION OF FUNCTIONAL CERAMIC OBJECTS <u>Zora Hajdúchová</u> , Peter Veteška, Ľuboš Bača, Jozef Feranc, Marián Janek.....	160
4Po05 REACTION OF PFCS IN WATER STABILIZED PLASMA <u>Libor Mastný</u> , Jan Horníček, Oldřich Živný, Vlastimil Brožek, Viktor Sember.....	161
4Po06 STANOVENÍ TEXTURNÍCH CHARAKTERISTIK BIOUHLÍ (BIOCHAR) <u>Miloslav Lhotka</u> , Veronika Liworová	161
4Po07 ADSORPCE CO ₂ NA BIOUHLÍ (BIOCHAR) <u>Veronika Liworová</u> , Miloslav Lhotka	162
4Po08 SPHEROIDIZATION OF INORGANIC COMPOUNDS BY THE LPPS METHOD <u>Libor Mastný</u> , Vlastimil Brožek, Jan Medřický, Ivo Marek	162
4Po09 VPLY AL ₂ O ₃ A LIF NA VLASTNOSTI NÍZKOTOPICICH SA ELEKTROLYTOV NA BÁZE KF-ALF ₃ SYSTÉMOV <u>Jarmila Mlynáriková</u> , Blanka Kubíková, Miroslav Boča	163
4Po10 FOTOINDUKOVANÉ ZMĚNY V TENKÝCH VRSTVÁCH CHALKOGENIDOVÉHO SKLA O SLOŽENÍ AS ₂₀ GE _{12,5} S _{67,5} PŘIPRAVENÝCH METODOU SPIN-COATING <u>Karel Pálka</u> , Stanislav Šlang, Miroslav Vlček.....	163
4Po11 SYNTHESIS OF OXIDE CERAMIC NANOMATERIALS FROM ELECTROSPUN POLYMER PRECURSOR BLENDS <u>Ivan Shepa</u> , Erika Múdra, Magdaléna Strečková, Ján Dusza	164
4Po12 OXOFLUOROALUMINATES IN THE SYSTEM RBF-ALF ₃ -AL ₂ O ₃ -RB ₂ O: THERMAL STABILITY AND STRUCTURAL CORRELATION <u>František Šimko</u> , Aydar Rakhmatullin, Pierre Florian, Martin Kontrík, Zuzana Netriová, Catherine Bessada	164
4Po13 PRODUCTION AND CHARACTERIZATION OF CARBONIZED SORBENT PRODUCTS OPTIMIZED FOR ANIONIC CONTAMINANTS <u>Eva Viglasova</u> , Michal Galambos, Dávid Divis, Rebecca Hood-Nowotny, Gerhard Soja	165
4Po14 SYNTÉZA, CHARAKTERIZACE AND BIOLOGICKÁ AKTIVITA KATIONTOVÝCH VANADOCENOVÝCH A 1,1'-DIMETHYLVANADOCENOVÝCH KOMPLEXŮ Lucie Melounková, Aneta Machálková, Radim Havelek, Jan Honzíček, <u>Jaromír Vinklár</u>	165

Postery - sekcia 5 Organická chémia..... 166

5Po01 γ -OXO- α -AMINO ACIDS AS 1,3-BIFUNCTIONAL NUCLEOPHILES IN THE SYNTHESIS OF CONSTRAINT HPA-12'S ANALOGUES Marián Zeman, Branislav Ferko, <u>Dušan Berkeš</u>	166
5Po02 Cu-KATALYZOVANÉ KONJUGOVANÉ ADÍCIE ORGANOZIRKONIČITÝCH NUKLEOFILOV NA α,β -NENASÝTENÉ HETEROCYKLICKÉ ENÓNY <u>Stanislav Bilka</u> , Ivana Némethová, Radovan Šebesta	167

5Po03 PUSH-PULL MOLEKULY VE TVARU PÍSMENE X <u>Filip Bureš</u> , Milan Klikar, Jiří Tydlitát, Zuzana Hloušková.....	167
5Po04 VPLYV PRÍTOMNOSTI ALFA-HYDROXYSKUPINY NA PRIEBEH DOMINO PALÁDIOM(II)-KATALYZOVANEJ CYKLIZÁCIE A HECKOVEJ VINYLÁCIE <u>Jana Doháňošová</u> , Angelika Lásiková, Tibor Gracza.....	168
5Po05 SYNTÉZA OLYGOTIENYL-ACÉNOVÝCH DERIVÁTOV S ELEKTRÓNAKCEPTORNÝMI RAMIENKAMI AKO POTENCIÁLNYCH POLOVODIČOV N-TYPU <u>Lucia Feriancová</u> , Martin Putala	168
5Po06 FLUORINATED CERAMIDE TRAFFICKING INHIBITORS AS ALZHEIMER'S DISEASE RADIOMARKERS <u>Branislav Ferko</u> , Dušan Berkeš, Simone M. Crivelli	169
5Po07 SYNTHESIS AND ANTIMYCOBACTERIAL ACTIVITY OF SUBSTITUTED <i>N</i> - PHENYL-1-HYDROXYNAPHTHALENE-2-CARBOXAMIDES <u>Tomáš Goněc</u> , Šárka Pospíšilová, Michnová, Jiří Kos, Alois Čížek, Josef Jampílek	169
5Po08 VLIV SUBSTITUCE NA 1,3-DIPOLÁRNÍ CYKLOADICI ARYLSYDNONŮ S ARYLACETYLENY Veronika Hladíková, Jiří Hanusek	170
5Po09 ORGANICKÉ PUSH-PULL CHROMOFORY PRO FOTOREDOX KATALÝZU <u>Zuzana Hloušková</u> , Filip Bureš.....	170
5Po10 SYNTÉZA A <i>IN VITRO</i> BIOLOGICKÉ STUDIE <i>N</i> -CYKLOALKYLKARBAMÁTŮ <u>Eva Horáková</u> , Pavel Drabina, Katarína Vorčáková, Šárka Štěpánková, Lenka Brůčková, Miloš Sedlák.....	171
5Po11 QUINAZOLINONE SCHIFF BASES AS POTENTIAL ANTICANCER AGENTS: SYNTHESIS, SPECTROSCOPIC PROPERTIES AND BIOLOGICAL EVALUATION Michal Hricovíni, Katarína Kozics, Annamária Srančíková, <u>Zuzana Hricovíniová</u>	172
5Po12 DESIGN A SYNTÉZA BITIOFÉNOVÝCH DERIVÁTOV PRE MODIFIKÁCIU POVRCHU DIELEKTRIKA <u>Iveta Kmentová</u> , Lucia Feriancová, Martin Putala.....	172
5Po13 CHEMICKÁ SYNTÉZA PREKURZOROV VHODNÝCH PRE PRÍPRAVU INHIBÍTOROV GLYKOZYLTRANSFERÁZ <u>Jana Jakubčinová</u> , Ján Hirsch, Igor Tvaroška, Marek Baráth.....	173
5Po14 DIPOLÁRNÍ CHROMOFORY S π -KONJUGOVANÝM SYSTÉMEM NA BÁZI DIAZINŮ <u>Milan Klikar</u> , Filip Bureš, Sylvain Achelle.....	173
5Po15 APPLICATION OF THE BROOK REARRANGEMENT IN TANDEM WITH SINGLE ELECTRON-TRANSFER OXIDATIVE AND RADICAL PROCESSES <u>Mikhail Klychnikov</u> , Ullrich Jahn.....	174
5Po16 VROZENÉ DYSFIBRINOGENEMIE A HYPOFIBRINOGENEMIE V ČR <u>Roman Kotlín</u> , Jana Štikarová, Jiří Suttar, Ondřej Pastva, Eliška Ceznerová, Peter Salaj, Jan Loužil, Jan E. Dyr	174

5Po17 SYNTÉZA ANTIMYKOBAKTERIÁLNE ÚČINNÝCH MOLEKUL VHODNÝCH PRO KONJUGACI S PEPTIDOVÝMI DRUG DELIVERY SYSTÉMY <u>Martin Krátký</u> , Jiřina Stolaříková, Jarmila Vinšová.....	175
5Po18 ŠTÚDIUM VPLYVU ORGANOKATALYZÁTOROV NA IRELANDOV A JOHNSONOV-CLAISENOV PREŠMYK <u>Dominika Krištofiková</u> , Mária Mečiarová, Radovan Šebesta	175
5Po19 Pd-CATALYSED CARBONYLATIONS IN MICRO-FLOW SYSTEM <u>Pavol Lopatka</u> , Martin Markovič, Peter Kooš, Tibor Gracza.....	176
5Po20 APPLICATION OF HIGHLY SYN-STEREOSELECTIVE 1,3-DIPOLAR CYCLOADDITION OF FIVE-MEMBERED CYCLIC NITRONES IN THE SYTHESIS OF HYACINTHACINES <u>Tomáš Malatinský</u> , Róbert Fischer	176
5Po21 PYRAZINACENY, AZA-ANLOGY ACENŮ <u>David Miklík</u> , Jonathan Patrick Hill, Filip Bureš.....	177
5Po22 ENANTIOSELEKTÍVNA SKVARAMIDMI KATALYZOVANÁ MICHAELOVA ADÍCIA 4-HYDROXYKUMARÍNU NA AKTIVOVANÉ ALKÉNY <u>Viktória Modrocká</u> , Eva Veverková, Radovan Šebesta	178
5Po23 NEW METHODOLOGY FOR THE SYNTHESIS OF ALFAPROSTOL KEY INTERMEDIATES VIA STILLE COUPLING <u>Sara Monteiro</u> , Aleš Imramovský, Karel Pauk, Radka Pavelová, Jan Pavlík.....	178
5Po24 MEĎOU KATALYZOVANÁ ENANTIOSELEKTÍVNA KONJUGOVANÁ ADÍCIA ALKYLBORÁNOV <u>Bernard Mravec</u> , Kristína Plevová, Radovan Šebesta.....	179
5Po25 DIASTEREOSELEKTÍVNA CYKLOADÍCIA AZOMETÍNOVÝCH YLIDOV <u>Kristína Ormandyová</u> , Tibor Peňaška, Mária Mečiarová, Radovan Šebesta.....	179
5Po26 SYNTÉZA SUBSTITUOVANÝCH CHIRÁLNIČ BENZTHIAZOLOVÝCH KARBAMÁTŮ JAKO POTENCIÁLNIČ LÉČIV ALZHEIMEROVY CHOROBY <u>Vladimír Pejchal</u> , Marcela Pejchalová, Karel Královec, Radim Havelek, Zdeňka Růžicková	180
5Po27 SYNTÉZA SUBSTITUOVANÝCH ANTIFUNGÁLNIČ CHIRÁLNIČ BENZTHIAZOLOVÝCH DIAMIDŮ <u>Marcela Pejchalová</u> , Karel Královec, Radim Havelek, Vladimír Pejchal, Zdeňka Růžicková	180
5Po28 ENANTIOSELEKTÍVNA SYNTÉZA POKROČILÉHO INTERMEDIÁTU AETHERAMIDU A <u>Tibor Peňaška</u> , Martin Kotora.....	181
5Po29 MEĎOU KATALYZOVANÁ ENANTIOSELEKTÍVNA KONJUGOVANÁ ADÍCIA ALKYLBORÁNOV <u>Bernard Mravec</u> , Kristína Plevová, Radovan Šebesta.....	182
5Po30 PUSH-PULL CHROMOFORY S MOTIVEM THIENO[3,2- <i>b</i>]THIOFENU <u>Jan Podlesný</u> , Filip Bureš.....	182

5Po31 SYNTÉZA A CHARAKTERIZÁCIA NOVÝCH BTBT DERIVÁTOV S ALKYLTIOLFÉNOVÝM JADROM <u>Róbert Šandrik</u> , Pavol Tisovský, Anton Gáplovský, Martin Weis.....	183
5Po32 SYNTÉZA POTENCIÁLNEHO INHIBÍTORA A-MANOZIDÁZY II NAVRHNUTÉHO POMOCOOU MOLEKULOVÉHO MODELOVANIA <u>Mária Spišáková</u> , Maroš Bella, Miroslav Kooš.....	183
5Po33 JODOVANÁ RADIOZNAČITELNÁ ANALOGA CHOLINU PRO DIAGNOSTIKU A TERAPII <u>Pavel Švec</u> , Jan Kučka, Ondřej Sedláček, Martin Hrubý, Zbyněk Nový, Miloš Petřík, Marián Hajdúch	184
5Po34 KAPILÁRNÍ MONOLITICKÁ KOLONA PRO ASYMETRICKOU HENRYHO REAKCI Gabriela Nováková, <u>Jan Svoboda</u> , Pavel Drabina, Miloš Sedlák.....	185
5Po35 SYNTÉZA BOROVÝCH HETEROCYKLŮ REAKCÍ DIAZONIOVÝCH SOLÍ S β - ENAMINOAMIDY <u>Markéta Svobodová</u> , Luboš Socha.....	185
5Po36 S TRIFENYLAMINY K BÍLÝM SVĚTLO EMITUJÍCÍM DIODÁM <u>Jiří Tydlitát</u> , Sylvain Achelle	186
5Po37 KINETICKÉ ROZLIŠENIE MICHAELOVEJ ADÍCIE V SYNTÉZE 4- METYLPREGABALÍNU <u>Denisa Vargová</u> , Rastislav Baran, Radovan Šebesta.....	186
5Po38 SCHIFFOVY BÁZE ODVOZENÉ OD SULFADIAZINU – SYNTÉZA A ANTIBAKTERIÁLNÍ AKTIVITA Martin Krátký, Jiřina Stolaříková, Klára Konečná, <u>Jarmila Vinšová</u>	187
5Po39 PREPARATION AND REACTIVITY OF 5-BROMOISOXAZOLIDINE <u>Ondrej Záborský</u> , Ján Moncol', Jana Doháňošová.....	187

Postery - sekcia 6 Polyméry 188

6Po01 VLIV DERIVÁTŮ FERROCENU NA ZASYCHÁNÍ ALKYDOVÝCH NÁTĚROVÝCH HMOT <u>Jan Honzíček</u> , Jaromír Vinklár, Petr Kalenda	188
6Po02 MONOMÉRY NA BÁZE BUTYROLAKTÓNU PRE PRÍPRAVU HYDROGÉLOV A POLYMÉRNÝCH NANOČASTÍČ <u>Ludmila Hrčková</u> , Jozef Kollár, Miroslav Mrlík, Sharmaine B. Luk, Jaroslav Mosnáček	189
6Po03 TERMICKÉ VLASTNOSTI KYSELINY POLYMLIEČNEJ PO APLIKÁCIÍ UV ŽIARENIA <u>Ivica Janigová</u> , Katarína Csomorová, Agnesa Fiedlerová, Lyda Rychlá, Jozef Rychlý, Miroslav Šlouf.....	189
6Po04 TRACKING OF DOUBLE-LABELED THERMORESPONSIVE POLYMER BIOLOGICAL BEHAVIOR Lenka Loukotová, <u>Věra Kolářová</u> , Mariana Veselá, Jan Kučka, Martin Hrubý, Mariia Rabyk, Pavla Francová, Petr Pár, Tomáš Heizer, Luděk Šefc.....	190

6Po05 THERMORESPONSIVE SELF-ASSEMBLED BLOCK COPOLYMERS AS CONTRAST AGENTS FOR NON-INVASIVE MEDICAL IMAGING <u>Kristýna Kolouchová</u> , Ondřej Sedláček, David Babuka, Daniel Jiráček, Jan Kotek, Martin Hrubý	190
6Po06 PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE SCAFFOLDU PRO KOSTNÍ TKÁŇOVÉ INŽENÝRSTVÍ <u>Lucie Kománková</u> , Martin Pařízek, Helena Hlídková, Martin Hrubý, Miroslav Vetrík	191
6Po07 ANTIMIKROBIÁLNE POLYMÉRNE NANOKOMPOZITY <u>Mária Kováčová</u> , Zoran Marković, Petr Humpolíček, Marián Lehocký, Pavel Kubát, Helena Švajdlenková, Zdenko Špitálský	191
6Po08 POLYMERS FOR BIMODAL IMMUNORADIOTHERAPY – ARE THEY ABLE TO PROMOTE IMMUNE SYSTEM? <u>Lenka Loukotová</u> , Jan Kučka, Mariia Rabyk, Anita Hoecherl, Kristýna Venclíková, Olga Janoušková, Rafal Konefal, Věra Kolářová, Luděk Šefc, Petr Štěpánek, Martin Hrubý	192
6Po09 KOMPOZITY NA BÁZE POLYETYLÉNU PLNENÉ BIODEGRADOVATELNÝM PLNIVOM <u>Zuzana Nógellová</u> , Andrea Fečková, Mária Kováčová, Angela Kleinová, Michaela Sedničková, Ondrej Žigo, Zdenko Špitálský	192
6Po10 NOVÉ TYPY PROTIELEKTROD V SOLÁRNYCH ČLÁNKOCH Jaroslav Kuliček, Michal Procházka, Matej Mičušík, Pavol Gemeiner, Milan Mikula, Aysegul Uygun Oksuz, <u>Mária Omastová</u>	193
6Po11 JOINING OF RUBBER SUBSTRATE WITH BRONZE SURFACE BY THE METHOD OF MOLECULAR ADHESION <u>Jan Oravec</u> , Jozef Preto, Hidetoshi Hirahara, Jing Sang, Jan Hronkovic, Pavol Melus	193
6Po12 BISDECYLSEXITHIOPHENE-POLYETHYLENE OXIDE COPOLYMER NANODOMAIN THEORETICAL MODELLING: MORPHOLOGY AND PHOTOPHYSICS T. Palszegi, E. Jane, J. Sepelak, D. Repovsky, I. Bugar, G. Cik, D. Velic.....	194
6Po13 SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF NEW AMPHIPHILIC BLOCK-GRADIENT COPOLYMERS OF STYRENE AND 2-DIMETHYLAMINOETHYL ACRYLATE <u>M. Rabyk</u> , E. Deniau, L. Billon, O. Borisov, M. Hruby, P. Stepanek.....	194
6Po14 SYNTÉZA A CHARAKTERIZACE 6-AMINOHYLURONANU <u>Petra Šedová</u> , Radovan Buffa.....	195
6Po15 MEBENDAZOL: OD LÉČBY PARAZITÁRNÍCH INFEKCIÍ PO TERAPII NÁDORŮ <u>Martin Studenovský</u> , Viktor Černý, Ladislav Sivák.....	195
6Po16 BIOLOGICAL EFFECT OF BEECH GLUCURONOXILAN SULFATES Turjan J. , Pujol C.A., Damonte E.B., Kozák J., Capek P.....	196
6Po17 INFLUENCE OF POLAR GROUPS GRAFTING TO METALLOCENE POLYOLEFINS ON HOT MELT ADHESIVE PROPERTIES IN PACKAGING INDUSTRY Juraj Pavlinec, Ivan Chodák, Igor Novák, <u>Vladimír Vanko</u> , Jozef Preťo	196

Postery - sekcia 7 Jadrová chémia 197

- 7Po01 PŘÍPRAVA PALIV TYPU CERCER „METODOU PAN“
Kryštof Adámek, Ferdinand Šebesta, Ivo Jakubec 197
- 7Po02 ZNAČENÍ BRASSINOSTEROIDŮ TEŽKÝMI IZOTOPY VODÍKU
Břetislav Brož, Aleš Marek 197
- 7Po03 ANALÝZA PRAVĚKÉHO NÁRAMKU METODOU FOTONOVÉ AKTIVAČNÍ
 ANALÝZY
Ivana Krausová, Jan Tajer, David Chvátil 198
- 7Po04 SYNTÉZA TRITIEM ZNAČENÉHO (S)-METHOPRENU
Aleš Marek 198
- 7Po05 NEUTRONOVÁ AKTIVAČNÍ ANALÝZA POZDNĚGLACIÁLNÍCH JEZERNÍCH
 SEDIMENTŮ
Jiří Mizera, Václav Procházka, Günther Kletetschka 199
- 7Po06 SNÍŽENÍ RADIAČNÍ CITLIVOSTI MIKROORGANISMŮ OZÁŘENÝCH UV
 ZÁŘENÍM V PŘÍTOMNOSTI VYCHTÁVAČŮ OH RADIKÁLŮ
Barbora Neužilová, Viliam Múčka 199
- 7Po07 PŘÍPRAVA TERČOVÝCH MATERIÁLŮ S FLUORIDOVOU MATRICÍ KE
 STANOVENÍ ^{236}U PROSTŘEDNICTVÍM URYCHLOVAČOVÉ HMOTNOSTNÍ
 SPEKTROMETRIE
Tomáš Prášek, Irena Špendlíková, Mojmír Němec 200

Postery - sekcia 8 Vyučovanie a história chémie 201

- 8Po01 INTERAKTIVNÍ APLIKACE PRO SAMOSTUDIUM ORGANICKÉ CHEMIE
Daniel Bartoň, Radek Cibulka, Ondřej Kunderát, Markéta Rybáčková, Miroslav Šimek, Martin
 Mastný 201

Postery - sekcia 9 Životné prostredie, potravinárstvo a biotechnológie 201

- 9Po01 REMOVAL OF METALS FROM WATER USING SULFUR-OXIDIZE AND SULFATE-
 REDUCING BACTERIA
Zuzana Blažková, Vojtěch Trousil, Iveta Stanová, Jiří Palarčík, Miloslav Slezák, Jiří Cakl 201
- 9Po02 KOMPLEXNÁ IZOLÁCIA LÁTOK S VYSOKOU PRIDANOU HODNOTOU Z
 PLANTAGO LANCEOLATA
Alžbeta Chochulová, Vladimír Štefuca, Janka Kubincová, Jozef Višňovský 202
- 9Po03 IDENTIFIKACE MIKROORGANISMŮ POMOCÍ MALDI-TOF VE VINOHRADNICTVÍ
 A VINAŘSTVÍ
Jaromír Fiala, Petra Kubizniaková, Dagmar Matoulková, Jiří Sochor 202
- 9Po04 RAKYTNÍK REŠETLIAKOVÝ V NOVÝCH CEREÁLNÝCH PRODUKTOCH
Viera Jelemenská, Martina Benčíčová, Kristína Kukurová, Zuzana Ciesarová 203

9Po05 BASIC TESTING THE POTENTIOMETRIC DETECTION OF ZnSO_4 - CONCENTRATION CHANGES DUE TO ITS NANOFILTRATION BY USING THE ZINC AMALGAM ELECTRODE <u>Ladislav Novotný</u> , Veronika Kočanová, Libor Dušek, Abraham Kabutey, Petr Mikulášek, Renáta Petráňková, Aneta Karásková	203
9Po06 VYBRANÉ ASPEKTY DĚJŮ SPOJENÝCH S (NANO)AGLOMERAČNÍMI, (ELEKTRO)SORPČNÍMI MEZIFÁZOVÝMI, ELEKTRODETEKČNÍMI A ELEKTROSEPARAČNÍMI PROCESY <u>Ladislav Novotný</u>	204
9Po07 TESTY EKOTOXICITY VYBRANÝCH MIKROPOLUTANTŮ <u>Jiří Palarčík</u> , Petra Bencová, Zuzana Blažková, Vojtěch Trousil	204
9Po08 POROVNÁNÍ KJELDAHLOVY A DUMASOVY METODY PRO STANOVENÍ OBSAHU N-LÁTEK V OBILOVINÁCH <u>Zuzana Pálková</u> , Marcela Vaničková	205
9Po09 OBSAH MINERÁLNÍCH LÁTEK V PRODUKTECH Z RAKYTNÍKU ŘEŠETLÁKOVÉHO Revenco D, Cejpek K, Koplík R.	205
9Po10 STUDIUM HYDROXYSKOŘICOVÝCH KYSELIN U MOŠTU A VÍNA KVAŠENÉHO AUTOCHTONNÍMI KVASINKAMI POMOCÍ HPLC-UV/VIS <u>Jiri Sochor</u> , Lenka Sochorova, Mojmir Baron, Jaromir Fiala	205
9Po11 STANOVENÍ TERPENICKÝCH LÁTEK U VÍNA KVAŠENÉHO PŮVODNÍMI DRUHY KVASINEK <u>Lenka Sochorova</u> , Mojmir Baron, Michal Kumsta, Jiri Sochor	206
9Po12 REMOVAL OF NONSTEROIDAL ANTI-INFLAMMATORY DRUGS BY HETEROGENEOUS PHOTOCATALYSIS <u>Vojtěch Trousil</u> , Zuzana Blažková, Oldřich Machalický, Jiří Palarčík, Jiří Cakl	206
9Po13 CADMIUM DISTRIBUTION IN MAIZE PLANTS <u>Zuzana Vatehová</u> , Anna Malovíková, Karin Kollárová, Desana Lišková	207

Postery - sekcia 10 Chemprogress - chemické technológie 207

10Po01 PROCESY ČISTĚNÍ HÉLIA PRO ÚČELY CHLAZENÍ REAKTORŮ ČTVRTÉ GENERACE <u>Jozef Dámer</u> , Jan Berka, Jan Vít	207
10Po02 UTILISATION OF CRUDE GLYCEROL FOR PREPARATION OF GLYCEROL CARBONATE <u>Alexander Kaszonyi</u> , Martin Zsigo, Livia Lepesova, Magdaléna Štolcova	208
10Po03 VLIV TYPU NOSIČE NA IMOBILIZACI RU KATALYZÁTORU PRO HYDROGENACI BUTYLSORBÁTU <u>Maria Kotova</u> , Klaudia Kollárová, Eliška Vyskočilová, Libor Červený	208
10Po04 LIGNÍN AKO ZLOŽKA FENOLFORMALDEHYDOVÝCH ŽIVÍC <u>Michal Procházka</u> , Zuzana Nógellová, Jakub Paluš, Lýdia Majerčíková, Dušan Velič	209

10Po05 EFFECT OF VARIOUS ORGANIC COMPOUNDS ADDITION ON THE SYNTHESIS OF NANOSTRUCTURED CU-FE-P-O CATALYSTS FOR BIOGAS SELECTIVE OXIDATION TO FORMALDEHYDE AND METHANOL Veronika Hergelová, <u>Magdaléna Štolcová</u> , Alexander Kaszonyi	209
10Po06 ŘÍZENÍ KONCENTRACE KYSLÍKU VE SLITINĚ PBBI METODOU ZMĚNY SLOŽENÍ KRYCÍHO PLYNU <u>Jan Vít</u> , Michal Kordač, Lucia Rozumová	210

Autorský index	211
-----------------------------	------------

Program prednášok	219
--------------------------------	------------

POZVANÉ PREDNÁŠKY

PLENÁRNA PREDNÁŠKA

PLP

**KERAMIKA NA BÁZE NITRIDU
KREMIČITÉHO – ÚŽASNÁ
MNOHORAKOSŤ JEJ POUŽITIA**Pavol Šajgalík¹

¹Ústav anorganickej chémie SAV, Dúbravská cesta 9,
845 36 Bratislava, Slovensko;
pavol.sajgalik@savba.sk

Keramika je **nekovový anorganický materiál** pripravený spekaním práškov. Podľa tejto definície patrí do rodiny keramických materiálov nielen čínsky porcelán, tehly, ale aj technická/pokročilá keramika s mnohými užitočnými vlastnosťami. A tak nás keramické súčiastky obklopujú stále viac aj v každodennom živote. Sú to napríklad substráty pre integrované obvody v mobilných telefónoch, alebo keramické vodovodné batérie, ako aj keramické nože predávané v halách nákupných centier. Jeden z predstaviteľov takejto keramiky je aj nitrid kremičitý, ktorý sa intenzívne skúma posledných takmer 40 rokov. Otázka znie, prečo?

Pretože nitrid kremičitý (Si_3N_4) je zaujímavá látka, ktorá sa vyznačuje kovalentným charakterom chemickej väzby a teda je charakterizovaná vysokou tvrdosťou, pevnosťou a chemickou stálosťou. Táto látka vo forme monokryštálu je ťažko pripraviteľná v rozmeroch potrebných na jej praktické využitie. Preto sa pripravuje polykryštalická keramika vo forme a tvare vhodnej na praktické aplikácie. Zaujímavosťou takejto keramiky je rôznorodosť jej použitia. Kým sa v osemdesiatych rokoch minulého storočia skúmala predovšetkým s ohľadom na jej použitie ako konštrukčného materiálu v strojárstve, dnes sa využíva aj ako luminofór umožňujúci získať z monochromatickej LED diódy „teplé“ biele svetlo, a čím ďalej tým viac aj ako bio-inertný materiál vhodný na náhradu kostí v ľudskom tele.

V prednáške budú predstavené spôsoby manipulácie štruktúry a mikroštruktúry tejto keramiky s ohľadom na jej konečné použitie.

PP1

**KONVERZE A SKLADOVÁNÍ ENERGIE
JAKO ŽHAVÉ TÉMA VYSPĚLÝCH
EKONOMIK. A JAKÁ JE NAŠE POZICE?**Karel Bouzek

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

S procesy spadajúcimi do kategórie konverzie a skladovania energie se setkáváme každý den a svůj život si bez nich již prakticky nedokážeme představit. Ať již se jedná o baterie/akumulátory v mobilních telefonech a automobilech usnadňujících náš každenní život, nebo například v kardiostimulátorech, kde život přímo zachraňují. Na masové rozšíření a využívání jsme tedy již zcela zvyklí. Možná nás tedy překvapí otázka v názvu tohoto příspěvku. Vždyť patříme mezi technicky rozvinuté země a využívání těchto technologií je u nás zcela srovnatelné se všemi sousedy, i se zeměmi vzdálenými.

Předmětem této přednášky však je problematika efektivního využití elektrické energie produkované obnovitelnými zdroji. Zdroji charakterizovanými variabilitou v čase a obtížně regulovaným výkonem. Zdroji, jejichž narůstající míra integrace do distribuční sítě energie charakterizuje poslední desetiletí a zároveň zdroji, které pro přenosovou soustavu celé řady zemí představují narůstající nebezpečí. Cílem této přednášky bude představit vodíkové technologie jako jeden ze systémů nabízejících řešení uvedeného problému, jejich vývoji a stavu implementace. Velmi zajímavé je z tohoto pohledu srovnání vnímání celé problematiky z perspektivy Evropské unie, zejména pak Německé spolkové republiky a Skandinávských zemí, v porovnání s Českou a Slovenskou republikou. Zmíněné rozdíly ve vnímání se nevztahují pouze na vlastní vodíkové technologie, ale na budoucnost energetiky jako celku.

PP2

**ASYMETRICKÁ ORGANOKATALÝZA
A ZELENÁ CHÉMIA – IDEÁLNE
PARTNERSTVO**Radovan Šebesta¹

¹Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra organickej chémie, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava
radovan.sebesta@uniba.sk

Súčasný environmetálne výzvy a stáletrvajúca potreba prípravy chirálnych zlúčenín kladú nové požiadavky na organickú syntézu. Efektívna príprava zlúčenín potrebných pre liečivá, materiály, alebo ochranu úrody musí okrem vysokej stereoselektivity sňať aj náročné environmentálne kritéria. Ideálna syntéza by sa mala pridržať princípov tzv. zelenej chémie ako napríklad eliminácia nebezpečných zlúčenín, znižovanie produkcie odpadu ale je časová a finančná efektívnosť. Asymetrická organokatalýza, teda použitie malých chirálnych organických molekúl ako katalyzátorov poskytuje veľké možnosti v syntéze dôležitých chirálnych zlúčenín a zároveň umožňuje efektívne implementovanie princípov zelenej chémie.

Viacere enantioselektívne organokatalytické reakcie, ako napríklad Michaelove adície aldehydov na nitroalkény, aminoxylácie a hydrazinácie aldehydov možno uskutočniť vo vodnom prostredí alebo úplne bez prítomnosti rozpúšťadla v guľovom mlyne [1]. Zistili sme, že tieto reakcie prebiehajú s vysokými výťažkami a vysoko enantioselektívne. Bezrozpúšťadlová technológia umožňuje tiež efektívnejšiu katalýzu pomocou organokatalyzátorov využívajúcich nekovalentné interakcie [2]. Chirálné tiomočoviny a skvaramidy sa v niektorých prípadoch ukázali byť enantioselektívnejšími katalyzátormi Michaelových adícií bez použitia rozpúšťadla ako v rozpúšťadlách. In-situ uvoľňovanie nestabilných aldehydov z acetálov pomocou kyslých iónových kvapalín a za použitia mikrovlnného žiarenia umožnilo vylepšiť organokatalytickú syntézu antivirotika oseltamivir [3].

[1] E. Veverková, V. Poláčková, L. Liptáková, E. Kázmerová, M. Mečiarová, Š. Toma, R. Šebesta, *ChemCatChem* **2012**, 4, 1013-1018; E. Veverková, V. Modrocká, R. Šebesta, *Eur. J. Org. Chem.* **2017**, 1191-1195.

[2] M. Hestericová, R. Šebesta, *Tetrahedron* **2014**, 70, 901-905.

[3] P. Tisovský, T. Peňaška, M. Mečiarová, R. Šebesta, *ACS Sust. Chem. Eng.* **2015**, 3, 3429-3434.

PP3

**ANORGANICKÉ PIGMENTY: OD
PRAVĚKU PO SOUČASNOST**Petra Šulcová

Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Katedra anorganické technologie, Studentská 573, 532 10 Pardubice, ČR
petra.sulcova@upce.cz

Počátky používání pigmentů sahají až do pravěku, což dokumentují jeskynní kresby z té doby. K tomuto účelu byly používány už i pigmenty převážně anorganického původu, především hlíny a okry, které po jemném roztlučení a smíšení s tukem, sloužily jako první jednoduché malířské barvy. Takovéto přírodní materiály se pro přípravu pigmentů využívaly až do dob průmyslové revoluce, kdy se začaly vyrábět první syntetické pigmenty v průmyslovém měřítku. Jejich produkce tak postupně vytlačila některé, v minulosti hojně používané přírodní pigmenty, a to zejména díky stále stoupajícím požadavkům na kvalitu pigmentů a také proto, že přírodní zdroje by nemohly rostoucí spotřebu pigmentů pokrýt.

Oblast anorganických pigmentů je stále aktuální a zajímavá, především pak v posledních letech, kdy dochází k výrazné spotřebě pigmentů, k čemuž přispívá jejich stále širší použití např. pro vybarvování nátěrových hmot, plastů a výrazně i možnost použití v nových aplikacích ve stavebnictví (tj. betony, fasádní hmoty, barevné střešní krytiny), včetně i použití v keramice pokud to termická a chemická stabilita pigmentů dovolí.

S postupem času se upravuje také složení pigmentů, neboť je kladen důraz na jejich hygienickou a ekologickou nezávadnost. Objevují se tak pigmenty, jejichž podstatou jsou sloučeniny, které byly v dřívější době cenově nepřijatelné díky obsahu prvků vzácných zemin.

PP4

OXIDAČNÝ STRES V ŽIVÝCH SYSTÉMOCH INDUKOVANÝ KOVMÍMarián Valko

*Fakulta chemickej a potravinárskej technológie,
Slovenská technická univerzita v Bratislave, 812 37
Bratislava
marian.valko@stuba.sk*

Ióny prechodných prvkov zohrávajú kľúčovú úlohu v mnohých biologických procesoch, preto sa ich homeostáza udržiava v prísne regulovaných medziach. Narušenie homeostázy redoxných kovov môže viesť k nekontrolovanej tvorbe reaktívnych foriem kyslíka (ROS, reactive oxygen species), napríklad prostredníctvom Fentonovej reakcie, kedy dochádza k tvorbe hydroxylových radikálov. Nadmerná tvorba hydroxylových radikálov môže spôsobiť oxidačné poškodenie biologických makromolekúl, vrátane DNA. Nerovnováha medzi tvorbou ROS a ich elimináciou pomocou antioxidačných obranných systémov v prospech ich tvorby sa nazýva oxidačný stres. Ukazuje sa, že oxidačný stres je spoločným menovateľom mnohých civilizačných ochorení, ako sú napríklad rakovina, kardiovaskulárne ochorenia, metabolické ochorenia a neurodegeneratívne ochorenia. V prípade neurodegeneratívnych ochorení, napr. Alzheimerovej choroby, môžu voľné kovy a/alebo komplexy kovov s amyloidom- β spôsobiť prostredníctvom Fentonovej reakcie poškodenie dôležitých biomolekúl mozgu, vrátane DNA. Preto chelatácia kovov, založená na aplikácii selektívneho multifunkčného chelátora predstavuje sľubnú terapeutickú stratégiu. Naopak, v prípade nádorových ochorení, aplikácia multifunkčných komplexných zlúčenín prechodných kovov môže indukovať dostatočne vysokú hladinu ROS, ktorá môžu viesť až k apoptóze nádorových buniek. Cieľom prednášky je pojednať o úlohe ROS pri vzniku a terapii ochorení, ktorých spoločným menovateľom je výskyt oxidačného stresu.

Pod'akovanie. Výskum prezentovaný v prednáške je podporovaný grantami VEGA 1/0686/17 a APVV-15-079.

PP5

KOORDINAČNÁ CHÉMIA N-OXIDOV AROMATICKÝCH AMÍNOVPeter Baran¹

¹*Juniata College, 1700 Moore Street, Huntingdon, PA
16652, USA
baran@juniata.edu*

Adenín 1-N-oxid bol prvým N-oxidom aromatických amínov publikovaný v roku 1960 ako ligand pri príprave koordinačných zlúčenín [1]. Nasledovali pyridín N-oxid a jeho deriváty. Od tých čias okolo dvesto N-oxidov bolo popísaných ako organické ligandy v koordinačných zlúčeninách. K derivátom pyridín N-oxidu pribudli Schiffove bázy obsahujúce pyridín N-oxidovú skupinu a N-oxidy iných aromatických amínov. Prvá kryštálová štruktúra s aromatickým amín N-oxidom bola publikovaná v roku 1965 [2]. Táto práca poukázala na schopnosť N-oxidov tvoriť mostíkové štruktúry so silnou interakciou kov-kov, výrazne ovplyvňujúcou magnetické vlastnosti viacjadrových komplexov s N-oxidovými ligandami.

Budú prezentované výsledky komplexačných štúdií N-oxidov aromatických polyamínov (bipyridíndioxidu, fenantrolínoxidu, fenatrolíndioxidu, imidazoldioxidu, pyridazíndioxidu, guanínoxidu, ...) s cieľom štúdia magnetických vlastností získaných komplexov pre aplikácie ako kontrastné látky v magnetickej rezonancii, alebo ako potenciálne jednomolekulové magnety. Bola tiež študovaná syntéza niekoľkých polydentátnych N-oxidových Schiffových zásad na báze pyridín N-oxidu a ich komplexov s prechodnými kovmi za účelom prípravy nových katalyzátorov pre organickú syntézu. Pripravené koordinačné zlúčeniny boli charakterizované kryštalograficky, spektroskopicky a štúdiom ich magnetických vlastností.

[1] D. D. Perrin: J. Am. Chem. Soc. 82, 5642-5645 (1960)

[2] H. L. Schäfer, J. C. Morrow, H. M. Smith: J. Chem. Phys. 42(2), 504-508 (1965)

PP6

BIOKATALÝZA - NÁSTROJ NA PRÍPRAVU CHEMIKÁLIÍ

Martin Rebroš, Kristína Markošová, Vladimír Krasňan, Tatiana Petrovičová, Michal Rosenberg

Ústav biotechnológie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia martin.rebros@stuba.sk

Biokatalýza je interdisciplinárny vedný odbor, ktorý využíva poznatky biotechnológie, molekulárnej biológie a organickej chémie, pričom využíva mikroorganizmy a enzýmy na produkciu látok s vysokou pridanou hodnotou.

Pri využití mikroorganizmov ako celobunkových katalyzátorov sa pritom často zapája celý ich metabolizmus a produkujú sa medziprodukty, ktoré majú potenciál na ďalšie využitie vo forme intermediátov pre chemickú syntézu. Pri tomto type produkcie sa využívajú obnoviteľné zdroje, často odpady, ktoré týmto získavajú na hodnote. Pre zvýšenie ekonomickej rentability produkcie metabolitov sa využíva ich kombinácia s ďalšími chemickými transformáciami, tzv. chemo-biokatalýza, pomocou ktorej sa pripravujú látky jednoreaktorovým (one pot) systémom.

Ďalším spôsobom využitia biokatalyzátorov je ich aplikácia vo forme enzýmov. Pre ich efektívnejšiu produkciu sa často využívajú techniky rekombinantných DNA, ktoré umožňujú výraznú nadprodukcii enzýmov. Takéto rekombinantné biokatalyzátory sa využívajú na prípravu špeciálnych chemikálií ako napr. produkcia chirálnych látok.

Pri využívaní mikroorganizmov aj enzýmov na biokatalýzu je dôležitá intenzifikácia procesov, ktorá umožňuje ich efektívnejšiu aplikáciu. Často sa využíva imobilizácia biokatalyzátorov. Je to technika ktorá umožňuje fixovanie mikroorganizmov v bioreaktoroch s ich vysokou koncentráciou a tým dochádza k zvýšeniu produktivity, výťažkov procesov a zlepšeniu ekonomiky pri aplikácii celých buniek i enzýmov. Prezentácia bude zameraná na všetky vyššie spomenuté aplikácie biokatalyzátorov.

Pod'akovanie. Táto práca vznikla vďaka podpore MŠVVaŠ SR v rámci OP Výskum a vývoj pre projekt: Univerzitný vedecký park STU Bratislava (UVP STU Bratislava), ITMS 26240220084, spolufinancovaný zo zdrojov Európskeho fondu regionálneho rozvoja. Táto práca bola podporená projektom GRAIL (Grant agreement no: 613667), ktorý je financovaný Európskou Komisiou v rámci 7. Rámcového programu

a bola dofinancovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. DO7RP-0045-12.

P1

IDENTIFIKÁCIA METABOLITOV VO FARMACEUTICKOM VÝSKUME

Igor Goljer

igornmr@aol.com

Vývoj jedného lieku v súčasnosti stojí približne jednu miliardu eur, pričom len každý tretí vráti investície vložené do jeho výskumu.

Pri vývoji nového potenciálneho liečiva (kandidáta) vo farmaceutickom priemysle je okrem účinnosti sa skúmajú aj ďalšie veľmi dôležité parametre, ktoré majú rozhodujúci význam pre využitie v liečebnom procese. Okrem iných je to aj dispozícia (vylúčenie) kandidáta a ľudského organizmu. Kandidát sa môže vylúčiť nezmenený (čo je veľmi zriedkavé), alebo vo forme metabolitov. Metabolity vznikajú v zažívacom trakte, pečeni, obličkách a ďalších častiach organizmu. Spolu s kandidátom sa metabolity nachádzajú v krvnom obehú a postupne dochádza k ich vylučovaniu. Metabolizmus kandidáta sa skúma "in vitro" inkubáciou v hepatocytoch, alebo "in vivo" v rôznych biologických systémoch ako hlodavce, alebo prípadne ďalšie zvieratá. Po dôkladnom vyhodnotení výsledkov "in vitro" a v pokusných zvieratách, ďalšou prípravnou fázou pred klinickými skúškami, je skúmanie metabolizmu kandidáta v dobrovoľníkoch (First Time in Human). Cieľom je odhaliť potencie nepriaznive účinky kandidata a metabolitov na ľudský organizmus, skôr než kandidát prejde do ďalšieho vývojového štádia.

V mojej krátkej prednáške sa chcem s Vami podeliť o moje skúsenosti pri skúmaní štruktúry metabolitov.

Pod'akovanie. Ďakujem Prof. Viktorovi Milatovi za pozvanie na 69. Zjazd Chemikov Slovenskej Chemickej Spoločnosti.

Referencie:

- [1] http://www.sukl.sk/sk/media/lieky-v-mediach/ako-sa-rodí-liek-dlho-a-draho?page_id=3578

P2**NOVÉ TECHNOLOGIE PRE NOVÉ VÝZVY**Mariana Danková*PRAGOLAB, s.r.o., Drieňová 34, 821 02 Bratislava
dankova@pragolab.sk*

Analýza malých a veľkých molekúl, nové látky, substancie, lieky či drogy, nové materiály, analýza proteínov a iné...toto všetko kladie vysoké nároky na inštrumentáciu, ktorej úlohou je pomôcť k poznaniu týchto látok, ich metabolitov, ich správania sa v rôznych podmienkach okolia, potreba ich charakterizácie až do najmenších podrobností.

Inštrumentácia, ktorá posúva hranice poznania - hmotnostný spektrometer Thermo Scientific™ Orbitrap Fusion™ Lumos™ Tribrid pre tie najpokročilejšie výskumné aplikácie, vrátane analýzy nízkej hladiny PTM, relatívnej kvantifikácie pomocou izobarického značenia, charakterizácie proteínov a MSⁿ analýzy malých molekúl atď., prináša najnovšie inovácie, ktoré zahŕňajú algoritmus APD (Advanced Peak Determination) a nové hardvérové možnosti: UVPD- nová technológia fragmentácie dosiahnutá s UV laserom a ultra vysoké rozlíšenie 1 000 000 FWHM.

P3**ANTON PAAR PRINÁŠA INOVATÍVNE RIEŠENIA PRE CHEMIKOV**Monika Babíková¹*¹Anton Paar Slovakia s.r.o., Aupark Tower,
Einsteinova 24, 851 01 Bratislava, www.anton-
paar.com*

Spoločnosť Anton Paar vyvíja, vyrába, distribuuje vysoko presné laboratórne prístroje a procesné meracie systémy a ponúka užívateľsky špecifické riešenia automatizácie a robotizácie. Anton Paar poskytuje komplexnú podporu analytickým prístrojom používaných po celom svete vo výskume, vývoji a kontrole kvality.

Anton Paar je svetovým lídrom na poli merania hustoty, viskozity, tokových vlastností, charakterizácie veľkosti častíc, SAXS, riešení v oblasti polymérov, mikrovlnnej prípravy vzoriek a syntézy. Riešenie od Anton Paar využívajú najväčší výrobcovia nealkoholických nápojov, pivovary, petrochemické, potravinárske, chemické, farmaceutické firmy a výskumné inštitúcie.

Riešenia v oblasti mikrovlnnej prípravy vzoriek a syntézy, okrem bežných aplikácií, otvárajú nové možnosti v špeciálnych aplikáciách ako **kyslíkové spaľovanie, rozklad pomocou UV žiarenia, hydrolýza, evaporácia, sušenie a extrakcia.**



Obr. 1. Multiwave GO – predstavuje unikátnu mikrovlnnú rozkladnú piecku, ktorá je charakterizovaná robustnosťou, ekonomicky výhodnou prevádzkou s užívateľsky veľmi intuitívnym ovládaním.

P4**OCHRANA A ZHODNOTENIE VÝSLEDKOV VÝSKUMU A VÝVOJA NA SLOVENSKU**Jaroslav Noskovič*Centrum vedecko-technických informácií SR,
Lamačská cesta 8/A, 811 04 Bratislava*

Výsledky výskumu a vývoja sú duševným vlastníctvom a tvoria určitú hodnotu. Je preto potrebné s nimi narábať ako s majetkom a zabezpečiť ich ochranu s primárnym cieľom – využiť tieto výsledky v praxi. Ochrana a komercializácia duševného vlastníctva spoločne tvoria transfer technológií. Ide o komplexný proces prenosu výsledkov výskumu a vývoja z vedeckovýskumných inštitúcií do hospodárskej a spoločenskej praxe. Za realizáciu transferu dosiahnutých výsledkov do praxe primárne zodpovedná samotná vedeckovýskumná inštitúcia, keďže daný výsledok je jej majetkom. Nakoľko však je zabezpečenie tohto procesu finančne a personálne náročné, vznikla na Slovensku iniciatíva na systematickú podporu transferu technológií, a to na celoštátnej úrovni. Podpora sa realizuje v rámci vybudovaného Národného systému podpory transferu technológií, za prevádzku ktorého zodpovedá Centrum vedecko-technických informácií SR (CVTI SR). Súčasťou podpory je najmä bezplatné poskytovanie expertných služieb a hradenie správnych poplatkov, prostredníctvom čoho je

uskutočňovanie transferu technológií sprístupnené všetkým verejným a štátnym vedeckovýskumným inštitúciám na Slovensku. Význam transferu technológií spočíva najmä v tom, že prispieva k zavádzaniu inovácií do praxe s cieľom zvyšovať konkurencieschopnosť priemyslu, pri súčasnom uplatňovaní princípov trvalo udržateľného rozvoja. Funkčný systém prenosu znalostí a technológií do praxe je prínosom nielen pre samotné vedeckovýskumné inštitúcie, ktorým zvyšuje príjmy a buduje ich dobré meno, ale často dosahuje aj celospoločensky významné výstupy.

P5

HUBY AKO ICH NEPOZNÁME

Miroslav Kríž

*Fedinova 6, 85101 Bratislava
miro.kriz@post.sk*

Mojej Fafinke na pamiatku.

V prírode sa nachádza nespočetné množstvo húb, od tých, čo sú voľným okom neviditeľne až po tie, ktoré končia na rajnici na mnohoraké spôsoby. Popri nich existujú aj huby nejedlé, mnohé sú významnými škodcami dreva. Z iného pohľadu sú nielen krásne, ale aj zdrojom mnohých zaujímavých látok. V minulosti sa im neprikladal žiadny význam pre človeka. Boli súčasťou rozkladných procesov biomasy. Dnes sa však ich výskum posunul mílovými krokmi dopredu a sú zdrojom zaujímavých a rôznorodých štruktúr. Jedno však majú všetky spoločné. Okrem primárneho metabolizmu, ktorý je nutný pre ich život, majú aj sekundárny metabolizmus, ktorého produktom sú príslušné metabolity. Tieto majú svoje vlastnosti nie len chemické, ale v značnej miere aj fyziologické. V tejto prednáške sa zoznámime s niektorými zástupcami drevokazných húb, ktoré majú veľmi zaujímavé a významné fyziologické vlastnosti. Mnohé sú jedy, iné zas v rozumných koncentráciách sú perspektívnymi liečivami. Pohľad na výskyt, vlastnosti, štruktúru a i syntézu nám priblíži z tejto strany nepoznaný svet húb okolo nás.

PREDNÁŠKY - SEKCIA 1: ANALYTICKÁ CHÉMIA

1P01

PERSPEKTÍVNE ELEKTROCHEMICKÉ SENZORY NA BÁZE DOPOVANÝCH DIAMANTOVÝCH ELEKTROD

Ľubomír Švorc

*Ústav analytickej chémie, Fakulta chemickej
a potravinárskej technológie, Slovenská technická
univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37
Bratislava, lubomir.svorc@stuba.sk*

Hlavné smery súčasného rozvoja v oblasti moderných elektroanalytických metód sa orientujú predovšetkým na vývoj nových a perspektívnych elektrochemických senzorov. Tie by mali spĺňať niekoľko základných požiadaviek pre ich spoľahlivé použitie v praxi ako napr. odolnosť voči pasivácii svojho povrchu, dostatočná citlivosť a selektivita, využiteľnosť v prietokových systémoch a široký potenciálový rozsah. Príspevok sa zaoberá vývojom nových elektroanalytických metód a postupov za využitia bórom dopovaných diamantových elektród. Tento elektródový materiál je v posledných rokoch využívaný ako citlivý elektrochemický senzor a spoľahlivá alternatíva ku konvenčným uhlíkovým materiálom (sklovitý uhlík, grafit). Elektrochemické senzory na báze bórom dopovaného diamantu významným spôsobom rozširujú možnosti stanovenia stopových a ultrastopových koncentračných hladín u rôznych štruktúrne a biologicky zaujímavých zlúčenín, ako napr. liečivá a ich metabolity [1], pesticídy [2], potravinové aditíva [3] a pod. V príspevku budú demonštrované niektoré konkrétne aplikácie bórom dopovaných diamantových elektród v oblasti farmaceutickej a klinickej analýzy. Rovnako budú diskutované aj prednosti moderných elektrochemických senzorov, ich možnosti, obmedzenie a perspektívy ďalšieho rozvoja v oblasti elektroanalýzy.

Autor ďakuje za podporu Vedeckej grantovej agentúre VEGA MŠ SR a SAV (projekt č. 1/0489/16).

- [1] Petr Samiec, Ľubomír Švorc, Dalibor Stankovič, Marian Vojs, Marián Marton, Zuzana Navrátilová: Sens. Actuators B 245, 963-971 (2017).

- [2] Ľubomír Švorc, Miroslav Rievaj, Dušan Bustín: Sens. Actuators B 181, 294-300 (2013).

- [3] Ľubomír Švorc, Kristína Cinková, Anchalee Samphao, Dalibor Stankovič, Eda Mehmeti, Kurt Kalcher: J. Electroanal. Chem. 744, 37-44 (2015).

1P02

REAKČNÁ ELEKTROANALÝZA NA ELEKTRODE Z DIAMANTU DOPOVANÉHO BÓROM: STANOVENIE CÍNU V BRONZOCH PRE KORDY PNEUMATÍK

Peter Tomčík¹, Zuzana Chomisteková-Lukáčová¹, Eva Culková¹, Renata Bellová¹, Danica Melicherčíková¹

*¹Katedra chémie a fyziky, Pedagogická fakulta,
Katolícka univerzita v Ružomberku, Hrabovská cesta
1, 034 01 Ružomberok, Slovenská Republika
peter.tomcik@ku.sk*

Vyvinuli sme jednoduchú a rýchlu metódu pre stanovenie Sn(II) v bronzoch pre pneumatiky. Uvedená technika je založená na synergistickej kombinácii elektródy z diamantu dopovaného bórom ako citlivého elektroanalytického senzora a reakčnej elektrochémie. Voltampérometrická odozva takéhoto systému sa zvyšuje chemickým cyklovaním jodidu, z ktorého sa elektrochemicky generuje jód a po reakcii s analytom sa vzniknutý jodid vracia späť na povrch indikačnej elektródy. Charakterizoval sa prenos elektrického náboja cez heterogénne rozhranie pre oxidáciu jodidu na jód v ôsmich rozličných základných elektrolytoch. Odhadli sa koeficienty prenosu náboja α (0.58 v 0.1 mol L⁻¹ H₃PO₄ - 0.35 v 0.1 mol L⁻¹ HCl), formálne potenciály (0.65 V v 0.1 mol L⁻¹ HClO₄ - 0.90 V pre 0.1 mol L⁻¹ NaHCO₃) ako aj štandardné heterogénne rýchlostné konštanty (4.6 × 10⁻³ cm s⁻¹ pre H₃PO₄ - 2.2 × 10⁻³ cm s⁻¹ pre NaHCO₃). Na základe týchto hodnôt možno konštatovať, že prenos náboja je v tomto prípade ireverzibilný, ale odozva je vhodná pre stanovenie cínu v oxidačnom stupni dva v kordoch pneumatík. Voltampérometriou s lineárnym nárastom potenciálu sa dosiahol detekčný limit 2.3 × 10⁻⁷ mol L⁻¹. Táto hodnota je porovnateľná s hodnotami ktoré sa dosiahli v prípade finančne a časovo náročných metódach, ktoré sa rutinne používajú pre tento typ stanovenia.

Autori ďakujú agentúram KEGA (projekt č. 006KU-4/2017) a GAPF (projekt č. 1/2/2016) za finančnú podporu tejto práce.

[1] Chomisteková Z., Culková E., Vojtko J., Brescher R., Tomčík P.: *Journal of Electroanalytical Chemistry* **758**, 46-53 (2015).

1P03

BOREM DOPOVANÉ DIAMANTOVÉ ELEKTRODY V ELEKTROANALÝZE LÉČIV

Renáta Šelešovská¹, Pavlína Martinková¹, Michaela Štěpánková¹, Lenka Janíková¹, Jaromíra Chýlková¹

¹Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
renata.selesovska@upce.cz

Jedna z prvních prací týkajících se diamantových elektrod byla publikována v roce 1983 [1]. Diamant je mimořádně mechanicky i chemicky stabilní, je jedním z nejlepších přírodních izolátorů a pro elektrochemické využití je nutné jej dopovat atomy jiných prvků, nejčastěji atomy boru [2]. Diamantové elektrody se používají ve formě tenkých polykrystalických filmů, které se připravují chemickou depozicí par. K depozici diamantového filmu se používá směs metanu a vodíku. Do směsi plynů se jako zdroj boru přidává diboran. Hlavními výhodami borem dopované diamantové elektrody (BDDE) jsou nízká kapacita elektrické dvojvrstvy, široké potenciálové okno umožňující studium katodických i anodických dějů, velmi nízká adsorpce látek na povrchu a biokompatibilita [3].

V rámci této práce byly s využitím BDDE vyvinuty voltametrické metody stanovení řady látek používaných v medicíně. Konkrétně se jedná o foláty kyselinu listovou (FA) a leukovorin (LV) a antifolát metotrexát (MTX). Foláty hrají klíčovou roli v metabolismu aminokyselin, při syntéze nukleových kyselin, při dělení a syntéze buněk a při tvorbě červených krvinek. MTX naopak inhibuje metabolismus FA a potlačuje dělení buněk. Využívá se jako cytostatikum a spolu s ním se podává LV jako antidotum na ochranu zdravých buněk. Dalšími analyzovanými látkami byly svalový relaxant dantrolen a mesalazin využívaný při léčbě střevních zánětů.

Tato práce byla financována z prostředků Univerzity Pardubice (projekty č. SGSFChT_2017_002 a SD373001/82/30350(2016)) a Grantové agentury České republiky (projekt č. 17-03868S).

- [1] Iwaki M., Sato S., Takahashi K., Sakairi H.: *Nucl. Inst. Meth. Phys. Res.* **209**, 1129 (1983).
[2] Swain G. M., Ramesham R.: *Anal. Chem.* **65**, 345 (1993).

[3] Pecková K., Musilová J., Barek J.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* **39**, 148 (2009).

1P04

PLANAR AND POROUS NANOCRYSTALLINE BORON-DOPED DIAMOND ELECTRODES FOR ELECTROANALYSIS: COMPARISON OF SPECTRAL, MORPHOLOGICAL AND ELECTROCHEMICAL PROPERTIES

Karolina Schwarzová¹, Simona Baluchová¹, Michal Nedvěd¹, Ivan Dittert², Jan Krůšek², Veronika Benson³, Vincent Mortet^{3,4}, Andrew Taylor⁴

¹Charles University, Faculty of Science, Department of Analytical Chemistry, UNESCO Laboratory of Environmental Electrochemistry, Albertov 6, 128 43 Prague 2, Czech Republic, kpeckova@natur.cuni.cz

²Institute of Physiology of the Czech Academy of Sciences, v. v. i, Vídeňská 1083, 142 20 Prague 4, Czech Republic

³Czech Technical University in Prague, Faculty of Biomedical Engineering, Sítňá Sq. 3105, 272 01 Kladno, Czech Republic

⁴Institute of Physics of the Czech Academy of Sciences, v. v. i, Na Slovance 2, 182 21, Prague, Czech Republic

Boron doping level, structural defects, non-diamond (sp²) carbon content, crystallite size, crystallographic orientation, and surface termination (H, O) are the main factors influencing the quality and properties of boron doped diamond (BDD)-based electrochemical sensors [1]. In the last decade, several strategies were developed to increase BDD specific surface area to enhance its sensitivity for electroanalysis, amongst other purposes [2,3].

In this study, BDD deposited on a porous template composed of SiO₂ fibres prepared by spin coating [3] was compared with conventional planar nanocrystalline BDD deposited on silicon substrates [1]. Microwave plasma enhanced chemical vapour deposition (MW PECVD) with variable B/C ratio in the gas phase 500 to 8000 ppm was used in both cases. Doping was induced by diborane (B₂H₆) gas. The morphology of the films was observed by SEM, which revealed mostly faceted grains with a size varying from ca 100 nm to 500 nm. Raman spectra of porous samples confirmed high levels of non-diamond carbon. Cyclic voltammetry with the outer- and inner sphere redox markers [Ru(NH₃)₆]^{3+/2+} and [Fe(CN)₆]^{3-/4-} and dopamine confirmed fast electron transfer kinetics for all as-deposited samples with higher current densities and proclivity to adsorption in the porous material.

This research was carried out within the framework of Specific University Research (SVV 260440). The research was financially supported by the Czech Science Foundation (projects 17-15319S).

- [1] Schwarzková-Pecková K., Vosáhllová J., Berek J., Šloufová I., Pavlova E., Petrák V., Zavázalová J.: *Electrochim. Acta* 243, 170–182 (2017).
- [2] Ruffinatto S., Girard H. A., Becher F., Amault J. C., Tromson D., Bergonzo P.: *Diam. Relat. Mater.* 55, 123–130 (2015).
- [3] Petrak V., Zivcova Z. V., Krysova H., Frank O., Zukal A., Klimsa L., Kopecek J., Taylor A., Kavan L., Mortet V.: *Carbon* 114, 457–464 (2017).

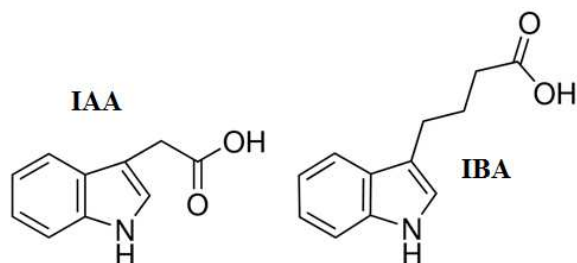
1P05

ANALÝZA ROSTLINNÝCH STIMULÁTORŮ ELEKTROCHEMICKÝMI METODAMI

Jaromíra Chýlková¹, Renáta Šelešovská¹, Lenka Janíková¹

¹Ústav environmentálního a chemického inženýrství,
Fakulta chemicko-technologická, Univerzita
Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice,
jaromira.chylkova@upce.cz

Regulátory růstu rostlin jsou látky ovlivňující jejich vývoj od vyklíčení či zakořeňování až po dozrání semen popřípadě plodů. Jsou buď přirozeného původu nebo se aplikují ve formě syntetických přípravků. Odborná literatura uvádí, že aplikace synteticky připravených fytohormonů má mnohdy lepší účinek [1]. Tyto přípravky jsou na trhu nabízeny ve formě prášků, gelů či roztoků pod nejrůznějšími obchodními názvy, např.: RHIZOPON, STIMULAX, SERADIX, SUNAGREEN a další. V těchto prostředcích jsou přítomny aktivní látky buď samostatně, nebo ve směsích, což vede k synergickému efektu tzn. že jejich účinek se násobí. Mezi nejčastěji aplikovanými látkami je kyselina indolyl-3-octová (IAA, obr. 1), kyselina indolyl-3-máselná (IBA, obr. 1), popřípadě kyseliny antranilové, salicylová a glutamová.



Obr. 1. Strukturní vzorce kyseliny indolyl-3-octové (IAA) a indolyl-3-máselné (IBA).

Některé z uvedených substancí jsou nestabilní, a proto je třeba průběžně kontrolovat aktuální složení aplikovaných přípravků. Tyto látky lze stanovit voltametrickou analýzou na základě jejich anodické oxidace. Potenciálové okno indikační elektrody musí zasahovat do značně pozitivních hodnot, což nejlépe splňuje borem dopovaná diamantová elektroda (BDDE). Z dostupných voltametrických technik lze využít metody LSV a DPV (Lineární stripping voltametrie a diferenční pulzní voltametrie) [2, 3], které nevyžadují nákladnou instrumentální techniku, jsou rychlé, spolehlivé a vykazují dostatečnou citlivost pro analyzované matrice.

Tato práce byla financována z prostředků Grantové agentury České republiky (projekt č. 17-03868S).

- [1] Kutina J.: *Regulátory růstu a jejich využití v zemědělství a zahradnictví. Státní zemědělské nakladatelství. Praha 1977.*
- [2] Chýlková J., Tomášková M., Jehlička V., Šelešovská R., Hlavatá P.: *Monatsh. Chem.* 148, 473 (2017).
- [3] Chýlková J., Jehlička V., Jeníková L., Šelešovská R., Tomášková M.: *XXXVII. Modern Electrochemical Methods (XXXVII Moderní elektrochemické metody), Jetřichovice, May 15th – 19th, 2017, Book of Abstracts (Navrátil T., Fojta M., Pecková K, eds.), p. 76.*

1P06

VYUŽITÍ ELEKTROCHEMIE PRO STUDIUM MODIFIKACE PROTEINŮ REAKTIVNÍMI PRODUKTY METABOLISMU

David Novák, Marika Svrčková, Martina Zatloukalová, Jan Vacek

Ústav lékařské chemie a biochemie, Lékařská fakulta
Univerzity Palackého, Hněvotínská 3, Olomouc, 775
15, david.novak@upol.cz

Metabolické děje produkují velké množství vysoce reaktivních vedlejších produktů. Kromě volných radikálů jde také o molekuly s jednou či více karbonylovými skupinami. Jedná se například o glyoxal, methylglyoxal a 3-deoxyglukoson.

Karbonylové skupiny ochotně tvoří s primárními aminy Schiffovy báze. Tímto mechanismem dochází ke tvorbě aduktů ve struktuře proteinů. Reakce probíhá, pokud dojde k interakci karbonylové sloučeniny s postranním řetězcem bazických aminokyselin, jako je lysin a arginin.

Tvorba týchto aduktů je spojovaná s celou radou patologických dějů a také s procesem stárnutí.

Tento příspěvek se zabývá aplikací elektrochemických metod pro studium karbonylace u vybraných modelových proteinů. Nemodifikované bazické aminokyselinové zbytky proteinu, při kontaktu s povrchem rtuťové elektrody, katalyzují vývoj vodíku [1]. Při tvorbě aduktů bazických aminokyselinových zbytků s karbonylovými sloučeninami dochází k významnému potlačení katalýzy [2]. Tímto přístupem je možné studovat výše zmíněné modifikace jak u ve vodě rozpustných tak i u membránových proteinů [3].

Tato práce vznikla za podpory vnitřního grantu Univerzity Palackého v Olomouci IGA_LF_2017_011.

- [1] Paleček E., Tkáč J., Bartošík M., Bertok T., Ostatná V., Paleček J.: *Chem. Rev.* 115(5), 2045-2108 (2015).
- [2] Havlíková M., Zatloukalová M., Ulrichová J., Dobeš P., Vacek J.: *Anal. Chem.* 87(3), 1757-1763 (2015).
- [3] Svrčková M., Zatloukalová M., Dvořáková P., Coufalová D., Novák D., Hernychová L., Vacek J.: *Free Radic. Biol. Med.* 108, 146-154 (2017).

1P07

ELECTROCHEMICAL ANALYSIS OF PRODUCTS OF TERMINAL DEOXYNUCLEOTIDYL TRANSFERASE TAILING REACTION USING INTRINSIC ELECTROACTIVITY OF NUCLEOBASES

Monika Hermanová¹, Miroslav Fojta¹

¹Biofyzikální ústav AV ČR, v.v.i. Královopolská 135, 612 65 Brno, hermanova@ibp.cz

DNA is electrochemically active, yielding reduction peaks of adenine and cytosine and oxidation peak of a reduction product of guanine at mercury electrodes and oxidation peaks of adenine and guanine at carbon electrodes [1]. In this study, we used this feature to study products of tailing reactions of the enzyme Terminal Deoxynucleotidyl Transferase (TdT). TdT is a DNA polymerase capable of adding random nucleotides to the 3' end of a primer, thus forming a 3' tail and unlike other DNA polymerases, it does not need a template [2]. As a primer, homooligonucleotides were used, to which a dNTP (or a mixture of dNTPs) and TdT were added to form the tail. Using electrochemical analysis, we were able not only to study how tailing reaction works for the various combinations of primers and nucleotides

but also to observe formation of DNA structures affecting the tailing reactions such as G quadruplexes and DNA hairpins.

This work was supported by the Czech Science Foundation grant No. 16-01625S.

- [1] E. Paleček and M. Bartošík, "Electrochemistry of nucleic acids," *Chem. Rev.*, vol. 112, no. 6, pp. 3427–3481, 2012.
- [2] G. Deng and R. Wu, "Nucleic Acids Research," vol. 9, no. 16, pp. 4173–4188, 1981.

1P08

CATALYSIS OF HYDROGEN EVOLUTION BY MODIFIED DNA AT MERCURY-BASED ELECTRODES AND ITS ANALYTICAL UTILIZATION

Miroslav Fojta, Jan Špaček, Peter Šebest, Aleš Daňhel, Petr Orsák and Luděk Havran

Institute of Biophysics of the CAS, v.v.i. Královopolská 135, 612 65 Brno, Czech Republic fojta@ibp.cz

Catalysis of hydrogen evolution (CHE) at mercury electrodes in the presence of proteins was discovered as early as in the 1920's. Unlike proteins, unmodified nucleic acids have not been reported yet to produce distinct signals due to the CHE. On the other hand, chemically modified DNAs bearing certain extrinsic groups produce analytically useful signals due to hydrogen evolution catalyzed by the respective modifications. One group of these species include complexes of transition metals such as osmium or platinum [1]. Another class of catalytically active groups that have been attached to DNA include non-metal organic moieties. Recently we have studied CHE by sulfur-containing unnatural bases (UB) 5SICS and TPT3 developed by F. Romesberg laboratory [2] to create a semisynthetic organism with extended genetic code. A strong catalysis of hydrogen evolution was observed also in the presence of aminobenzylidene-cyanoacetamide fluorophores introduced as environment-sensitive fluorescent DNA labels [3]. Thanks to a strong adsorption of DNA on the mercury-based electrodes, which are particularly suitable for the CHE measurements due to a high hydrogen overvoltage in the absence of the catalysts, and owing to high electron yields of the CHE reactions, sensitive voltammetric techniques for analysis of the modified NAs modification were developed.

Acknowledgment: This work was supported by Czech Science Foundation (grant No. P206/12/G151).

- [1] Fojta, M.; Danhel, A.; Havran, L.; Vyskocil, V., *Trac-Trends in Analytical Chemistry* 2016, 79, 160-167.
- [2] Zhang, Y.; Lamb, B.; Feldman, A.; Zhou, A.; Laverge, T.; Li, L.; Romesberg, F., *Proc Natl Acad Sci USA* 2017, 114 (6), 1317-1322.
- [3] Dziuba, D.; Pohl, R.; Hocek, M., *Chem Commun* 2015, 51 (23), 4880-4882.

1P09

ENANTIOMERNÍ SEPARACE NOVÝCH SYNTETICKÝCH DROG V RŮZNÝCH CHROMATOGRFICKÝCH MÓDECH

Michal Kohout

*Ústav organické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha
michal.kohout@vscht.cz*

V posledních letech se významným způsobem rozvíjí syntéza a distribuce nových syntetických drog (NSD).¹ Tyto látky nejsou uvedeny na seznamech zakázaných nebo sledovaných látek, avšak jejich struktura a účinky jsou mnohdy velmi podobné známým drogám jako jsou pervitin, extáze, THC, apod. Díky strukturní podobnosti pak tyto látky vykazují obdobné účinky, avšak vzhledem k jejich málo známé toxicitě mohou představovat mnohem vyšší zdravotní riziko než známé a plně charakterizované psychostimulační látky.

Jednu z významných skupin NSD představují syntetické katinony. Tyto látky jsou odvozeny od přírodního psychostimulancia - katinonu, který se nachází v rostlině kava jedlá. Katinon se v přírodě vyskytuje ve formě *S*-enantiomeru, avšak syntetické deriváty jsou zpravidla racemické. To přispívá k nevyzpytatelnému chování syntetických katinonů, neboť v chirálním systému živého organismu mohou enantiomery téže látky ovlivňovat různé receptory a podléhat různým metabolickým cestám.

Jedním z hlavních cílů současné forenzní analýzy NSD je tedy i jejich enantiomerní separace a posouzení biologického účinku jednotlivých enantiomerů na lidský organismus. V příspěvku budou ukázány různé techniky chirální separace syntetických katinonů a jejich předpokládaných metabolitů pomocí vysokoúčinné kapalinové chromatografie a superkritické fluidní chromatografie.

Tato práce vznikla za podpory České grantové agentury (projekt č. 16-17689Y).

- [1] Novel psychoactive substances: Classification, Pharmacology and Toxicology, Eds.: P. I. Dargan, D. M. Wood. Academic Press, Elsevier, 2013.
- [2] D. Wolrab, P. Frühauf, A. Moulisová, M. Kuchař, C. Gerner, W. Lindner, M. Kohout: *J. Pharm. Biomed. Anal.* 120 (2016) 306.

1P10

CHIRÁLNE SEPARÁCIE KVAPALNE-KRYŠTALICKÝCH MATERIÁLOV: VÝVOJ A OPTIMALIZÁCIA SEPARAČNÝCH METÓD PRE TYČINKOVITÉ MATERIÁLY POMOCOU HPLC NA CHIRÁLNYCH STACIONÁRNÝCH FÁZACH

T. Voitylová¹, M. Cigl¹, M. Kašpar¹, I. Korbecka², M. Zurowska³, V. Hamplová¹, D. Sýkora⁴

¹Fyzikální ústav AV ČR, v. v. i., Na Slovance 1999/2, 182 21 Praha 8, Česká republika

²Wydział Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego, ul. F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław, Poland

³Wydział Nowych Technologii i Chemii, Wojskowa Akademia Techniczna, ul. Gen. Sylwestra Kaliskiego 2, 00-908 Warszawa 49, Poland

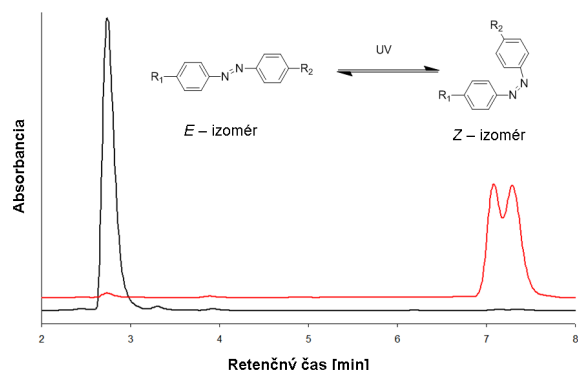
⁴Ústav analytické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika

Mezomorfne chovanie feroelektrických kvapalno-kryštalických materiálov (KKM) môže byť výrazne ovplyvnené optickou čistotou materiálov. Existuje niekoľko techník použiteľných k zisteniu enantioméneho zloženia opticky aktívnych látok, mnohé majú svoje nevýhody, napr. nízku citlivosť pri meraní optickej otáčavosti alebo náročné prístrojové vybavenie pri meraní spektier cirkulárneho dichroizmu.

Preto HPLC s použitím chirálnych stacionárnych fáz je pre tento účel najslubnejším prístupom. Vývoj analytických metód pre kvapalinovú chromatografiu KKM tyčinkového tvaru je komplikovaný veľkosťou molekuly daného materiálu a jeho rozpustnosťou v rozpúšťadlách používaných ako mobilné fáze. Pre tento účel polysacharidové chirálne stacionárne fáze vykazujú vysokú mieru použiteľnosti, ako aj selektivity a stability v separačných podmienkach normálneho módu. V neposlednej rade, majú výbornú dávkovaciu kapacitu, čo je nevyhnutné pre využitie v preparatívnej chromatografii.

Prezentácia je venovaná vývoju a optimalizácii metód delenia enantiomérov nových KKM. Najskôr bol vývoj separačných metód zameraný na štruktúrne jednoduchšie látky odvodené od kyseliny mliečnej [1] a technika bola následne

aplikovaná tiež na zložitejšie systémy s laterálne viazaným fluórom [2]. Vo všetkých prípadoch bola snaha pri delení racemických zmesí o separáciu enantiomérov na základnú líniu, ktorá bola v mnohých prípadoch dosiahnutá. Taktiež sa študovalo chovanie fotocitlivých materiálov obsahujúcich azo-skupinu obr. 1, kedy sa pracovalo v normálnom i reverznom separačnom móde [3-4].



Obr. 1. Chirálné delenie (*E*)-{4-[4-(2*S*,*R*)-2-methylbutoxy]fenyl} [4-(octyloxy)fenyl] diazénu na chirálnom selektore tris(3,5-dimethyl-fenylkarbamáte) amylózy. A - materiál pred ožiaréním, B - materiál vo fotostacionárnom stave. Separačné podmienky: Mobilná fáza Hex:1-BuOH, 99:1 (v/v) pri 25 °C

Autori ďakujú za finančnú podporu projektu č. 16-12150S (GAČR) a projektu č. LH 15305(MŠMT).

- [1] T. Vojtylova et al., Phase Trans., 8, 758 (2014)
- [2] T. Vojtylova et al., Liq. Cryst., 43, 1244 (2016)
- [3] T. Vojtylova et al., J. Sep. Sci., 38, 4211 (2016)
- [4] T. Vojtylova et al., J. Sep. Sci., 40, 1465 (2017)

1P11

DETERMINATION OF HYDRIDE FORMING ELEMENTS BY ATOMIC ABSORPTION SPECTROMETRY

Alena Manová, Martin Kroliak, Ernest Beinhrohr

*Institute of Analytical Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology,
Slovak University of Technology in Bratislava,
Radlinského 9, 812 37 Bratislava
alena.manova@stuba.sk*

The aim of this work was to develop an on-line coupling of electrochemical preconcentration to AAS method and the utilization of the developed system for the determination of ultra-trace amounts of hydride-forming elements in water samples. A flow-through electrochemical analyzer EcaFlow was used as the preconcentration unit with a two-electrode cell. The working electrode was an RVC electrode

coated with gold. An AAS spectrometer SP9 with graphite furnace atomizer (Pye Unicam) was used to measure the preconcentrated element species. The preconcentration parameters for the electrochemical process were optimized. Moreover, the determination of hydride-forming elements by GFAAS was optimised enabling a direct measurement also from HCl media. The preconcentration step was optimised and characterised.

This work was supported of VEGA MŠ SR and SAV (Project No.1 / 0489/16).

- [1] Greenhalgh, Alison (2001) Healthy living - Water BBC Health

1P12

PRETREATMENT STEPS IN ELEMENTAL ANALYSIS OF HAIR

Anna Krejčová¹, Lenka Bendakovská¹, Tereza Lexová¹

¹*Ústav environmentálneho a chemického inžinýrství,
Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10
Pardubice*

anna.krejцова@upce.cz

Hair and animal fur is often used to assess the organism load with various heavy metals, additive or doping substances and it seems to be a suitable environmental and health status monitor. These foreign chemicals are built in the protein structure of hair as a result of metabolic processes in the body or are trapped on hair surface after a direct contact with the environment. To obtain results of satisfactory quality, it is necessary to eliminate an external contamination. Washing steps are associated with a risk of releasing of analytes from the internal structure that are of analytical interest. Although many information on hair analysis is available, no standardised washing procedure exists.

A suitable washing solution was searched for. The effect of cold and hot water, HNO₃, acetone, Triton X-100 and EDTA was evaluated using a microscopic analysis of surface and elemental analysis (18 elements, ICP-OES, ICP-MS). No significant differences between agents were found with the exception of HNO₃ that partly digested hair samples. Therefore hot water seemed to be appropriate. The experiment, in which hair was contaminated with soil, sediment, fly ash and simulated sweat solution with addition of elements, was performed to demonstrate the efficiency of washing in hot water.

The authors are grateful to the project SG FCHT 05/2017 and the stud farm Siglavy for provided samples.

- [1] Hawkins D.P., Ragnarsdóttir K.V.: Sci. Tot. Environ. 407, 4140-4148 (2009).
- [2] IAEA: Report IAEA/RL/41 H, Vienna (1977).
- [3] Nomngongo, P.N., et al.: Microchim. J. 114, 141-147 (2014).

1P13

VYUŽITÍ MIKRO- A NANO-TECHNOLOGIÍ PRO ANALÝZU CHEMICKÉHO OBSAHU JEDINÉ BUŇKY

Karel Klepárník

*Ústav analytické chemie Akademie věd České republiky v.v.i., Veveří 97, 60200 Brno
klep@iach.cz*

Především díky rozvoji nanotechnologií v posledních deseti letech je možné analyzovat biologicky důležité molekuly a sledovat jejich reakce na povrchu i uvnitř živých buněk s nanometrovým prostorovým a pikosekundovým časovým rozlišením. Schopnost detekovat jedinou buňku, organelu nebo dokonce molekulu otvírá nebývalé možnosti pro bioanalytické aplikace. Pravděpodobně nejvýraznějšího pokroku bylo

dosaženo v oblasti sekvenování DNA (next generation sequencing). Nové technologie umožňují číst sekvenci nukleotidů jedné molekuly DNA s rychlostí jejich inkorporace DNA polymerázou paralelně v milionech reakčních nanozkumavek. Tímto způsobem byla zvýšena rychlost určení kompletní sekvence lidského genomu z měsíců na desítky minut za cenu blízkou se stu dolarů. Kromě technologie sekvenování DNA budou demonstrovány výsledky výzkumu aplikací nano-částic, kvantových teček, ve fluorescenční a elektronové mikroskopii. Ukázány budou naše výsledky aplikace chemických senzorů založených na Försterově rezonančním přenosu energie (FRET) při výzkum buněčných signálních drah. Na příkladu intenzivní a extrémně stabilní katodoluminiscence nanočástic ceram dopovaného granátu upozorním na význam korelativní světelné a elektronové mikroskopie při zobrazení transmembránových receptorů Fas a Fas-ligand.

Tento výzkum je podporován Grantovou agenturou České republiky, projektem č.: 17-01995s.

PREDNÁŠKY - SEKCIA 2: FYZIKÁLNA CHÉMIA

2P01

A MINIMAL PHYSIOLOGICALLY BASED PHARMACOKINETIC MODEL FOR NANOPARTICLES BIODISTRIBUTION

Tibor Dubaj, Peter Šimon, Zuzana Cibulková, Anna Vykydalová

*Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics,
Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak
University of Technology, Radlinského 9, 812 37
Bratislava, Slovakia
tibor.dubaj@stuba.sk*

Toxicity of nanoparticles (NPs) is related to concentration and duration of exposure. If one wants to assess the toxicity of any nanomaterial, two questions should be answered: (1) *Which tissues will come into contact with the NPs?* and (2) *Does the NPs cause any damage to the*

tissue(s)? The first question is within the scope of physiologically based pharmacokinetic (PBPK) modelling which can predict absorption, distribution, metabolism, and excretion of nanoparticles in humans.

The HISENTS project aims to develop a multiple-sensor platform for high throughput nanotoxicity screening. The platform will be accompanied with a parsimonious PBPK model with a minimum number of adjustable parameters. For this reason, a perfusion limited PBPK model requiring only one NP-specific parameter per tissue was proposed. The model assumes fast equilibration of NPs concentrations within all tissues which are modelled as well-stirred compartments and NPs inflow/outflow is only limited by the tissue perfusion. The model proposed was calibrated against *in vivo* data for nano-TiO₂ [1] and gave a reasonable agreement between predicted and measured NPs concentrations in the tissues. The main advantage of the model is that the biodistribution of NPs is described using only thermodynamic parameters (partition coefficients) which can be readily estimated from equilibrium data.

Acknowledgement: This work is financed by the project No. H2020-NMP-685817 High level Integrated SEnsor for NanoToxicity Screening (HISENTS).

- [1] G. Xie, C. Wang, J. Sun, G. Zhong G. Toxicol. Lett. 205 (2011) 55–61.

2P02

THERMOOXIDATIVE STABILITY OF POLYPROPYLENE/TiO₂ AND POLYPROPYLENE/LAYERED SILICATE NANOCOMPOSITES

Zuzana Cibulková, Anna Vykydalová, Tibor Dubaj, Peter Šimon

*Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia
zuzana.cibulkova@stuba.sk*

Polymer nanocomposites consisting of organic polymers and nanofillers represent an important class of polymers that have wide application in a number of various industrial sectors. Thermo-oxidative degradation of nanocomposites is one of the most serious problems, especially at processing. It leads to undesired changes in polymer's physical, mechanical and chemical properties. In this study, thermooxidative stability of polypropylene (PP), PP/TiO₂ and PP/Cloisite 10A nanocomposites was studied using non-isothermal DTA measurements. Moreover, the influence of additional processing cycles on the stability of all samples was investigated. For the treatment of the experimental results a method for the evaluation of the induction periods of thermal oxidation using non-Arrhenian temperature functions was employed [1]. Values of the induction periods were taken as a measure of the samples stability.

The lifetime of all PP samples decreases with additional processing cycles. The steepest decrease is observed after first and second additional passes through the extruder and then the stability remains almost constant up to five passes.

Acknowledgement: Financial support from the Slovak Research and Development Agency (APVV-15-0124) is gratefully acknowledged.

- [1] P. Šimon, D. Hynek, M. Malíková, Z. Cibulková, J. Therm. Anal. Calorim. 93 (2008) 817–821.

2P03

THERMOOXIDATIVE STABILITY OF ORGANIC SEMICONDUCTING MATERIALS USING NON-ISOTHERMAL DSC MEASUREMENTS

Anna Vykydalová, Zuzana Cibulková, Tibor Dubaj, Peter Šimon

*Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia
anna.vykydalova@stuba.sk*

One of the major research areas of organic semiconducting is focused on their design, synthesis and application in organic field effect transistors (OFETs). The continuously growing interest in OFETs is the result of the possibility of manufacturing low-cost large area and flexible circuits with a broad range of potential applications. However, thermooxidative degradation represents a weak aspect of these materials. Thermal oxidation exhibits an induction period (IP) [1]. The end of IP is characterized by a sudden change of material properties. Therefore, the length of the IP is frequently taken as a measure of a material stability.

The aim of this work was to study thermo-oxidative stability of organic materials used in OFETs (naphthalene derivatives with (5'-hexyl-2,2'-bitiophene-5-yl)ethynyl side arms attached to the naphthalene core in the positions 1 and 4, 1 and 5, 1 and 6 and analogous derivative with hexylbithienyl arms attached to the naphthalene core) using non-isothermal DSC measurements. Induction periods were calculated using Arrhenius and two non-arrhenian temperature functions (Berthelot-Hood and Šimon). It has been found that the extrapolation from high-temperature data to ambient temperature based on the Arrhenius function leads to unrealistically high values of IPs. Better results have been obtained using non-arrhenian temperature functions.

Acknowledgement: Financial support from the Slovak Research and Development Agency (APVV-15-0124).

- [1] P. Šimon, E. Kolman, J Therm Anal Cal. 2001;64:813–20.

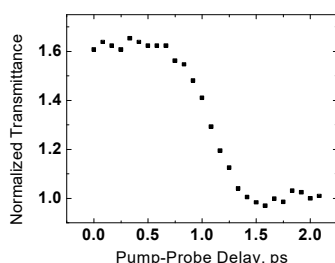
2P04

OD STATICKEJ THZ SPEKTROSKOPIE K THZ PUMP-PROBE EXPERIMENTU

Eva Noskovičová¹, Dušan Lorenc^{1,2}, Dušan Velič^{1,2}¹Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Univerzita Komenského, Bratislava²Medzinárodné laserové centrum, Bratislava

Terahertzové žiarenie má využitie v rôznych oblastiach vedeckého výskumu, keďže interakcia THz žiarenia s molekulami má za následok excitáciu módov translačného, rotačného a vibračného pohybu, ako aj vybudenie fonónových módov a oscilácií voľných nosičov náboja [1]. Spektroskopicky je možné študovať dynamiku medzimolekulových interakcií, fonónové odozvy, ale aj vodivosť materiálov.

V tejto práci bolo terahertzové žiarenie využité na charakterizáciu absorpčných a disperzných vlastností materiálov (od 0 do 6 THz), pomocou terahertzovej spektroskopie v časovej doméne, ako aj na štúdium ultrarýchlej dynamiky (v pikosekundách) nosičou náboja v tuhých látkach prostredníctvom časovo rozlíšenej terahertzovej spektroskopie. Pomocou terahertzovej spektroskopie v časovej doméne je zaznamenaná časová závislosť intenzity terahertzového poľa. Fourierovou transformáciou je potom možné stanoviť absorpčný koeficient a index lomu ako spektrálne závislosti. Merané materiály boli plasty na báze cyklických olefinov, ktoré vykazujú vhodné vlastnosti pre terahertzové aplikácie [2]. Časovo rozlíšenou terahertzovou spektroskopiou bol meraný polovodičový materiál GaAs, v ktorom sú nosiče náboja excitované žiarením s vlnovou dĺžkou 800 nm a 400 nm. Zároveň materiálom prechádza impulzné terahertzové žiarenie, ktorého priepustnosť materiálom (obr. 1) sa mení v závislosti od zmeny indukovanej vodivosti. V oboch technikách bolo terahertzové žiarenie generované v plazme pomocou laserového žiarenia s vlnovou dĺžkou 800 nm a detegované pomocou elektrooptickej detekcie.



Obr. 1. Zmena transmitancie THz sondovacieho impulzu pri prechode vzorkou GaAs pre excitáciu vlnovou dĺžkou 800 nm.

Tento článok vznikol vďaka podpore projektu APVV-15-0201.

- [1] Popov, V. V. (2011). Plasmon excitation and plasmonic detection of terahertz radiation in the grating-gate field-effect-transistor structures. *Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves*, 32(10), 1178-1191.
- [2] Sengupta, A., Bandyopadhyay, A., Bowden, B. F., Harrington, J. A., & Federici, J. F. (2006). Characterisation of olefin copolymers using terahertz spectroscopy. *Electronics Letters*, 42(25), 1477-1479.

2P05

ŠTÚDIUM DYNAMIKY ABSORPCIE A FLUORESCENCIE POLYTIOFÉNOV NA PRÍPRAVU SOLÁRNYCH ČLÁNKOV

Lenka Slušná¹, Ľudovít Haizer², Dimitrij Bondarev³, Dušan Velič^{1,2}¹Prirodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, slusnal@gmail.com²Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 842 15 Bratislava³Ústav Polymérov, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava

Organické (polyméry) solárne články sú založené na donoro akceptróných systémoch, pričom polytiofény vystupujú ako elektrónové donoroy a deriváty fullerénov ako elektrónové akceptory. Polytiofény sú vodivé vďaka delokalizácii elektrónov na tiofénových jadrách a ich konjugácii pozdĺž tiofénového reťazca, čo je nevyhnutné pre ich využitie v organických fotovoltických článkoch. Po ožiarení polyméru, sa elektrón excituje a prechádza z polymérneho HOMO orbitálu (Highest Occupied Molecular Orbital) do fullerénového LUMO orbitálu (Lowest Unoccupied Molecular Orbital). Tieto elektrónové prechody sú veľmi rýchle, na úrovni femtosekúnd a preto ich nemôže sledovať elektronicky, ale len opticky, pomocou časovo-rozlišenej spektroskopie. Porovnávané sú relaxačné časy novopripraveného polytiofénu P33 v roztoku chloroformu ($c=1.10^{-4}$ M) a zmes polytiofénu P33 s derivátom fullerénu (PCBM). V oblasti najväčšej absorpčnej zmeny (480nm) sa po pridaní elektrónového akceptora do roztoku relaxačný čas predĺžil z 94 ps na 109 ps, čo korešponduje s predchádzajúcimi štúdiami z časovo rozlíšenej fluorescence. Tento jav sa

vysvetľuje vytvorením komplexu, čo vedie k stabilizácii excitovaného stavu.

Táto práca vznikla vďaka finančnej podpore grantu VEGA 1/0400/16.

- [1] Kingsley, James W., Adam Green, and David G. Lidzey, *SPIE Photonic Devices Applications*. International Society for Optics and Photonics, 2009.
- [2] Ntwaeaborwa, O. M., et al. *Physica B: Condensed Matter* 407.10 (2012): 1631-1633.

2P06

IN SITU EPR AND UV-VIS-NIR SPECTROELECTROCHEMISTRY AS A UNIQUE TOOL FOR REDOX MECHANISMS STUDIES OF COORDINATION COMPOUNDS

Peter Rapta

*Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava, Slovak Republic
peter.rapta@stuba.sk*

In this contribution the redox behaviour of variety of Ni, Cu, Zn, V and Co metallocomplexes with noninnocent ligands which have been studied by cyclic voltammetry, EPR, in situ EPR-UV/vis/NIR spectro-electrochemistry and theoretical calculations is discussed. The experimental techniques such as cyclic voltammetry and EPR/UV-Vis-NIR spectroscopy provide important information on the changes in the electronic structure of solvated molecules in solution after electron and proton transfer. The combination of electrochemical and spectroscopic methods led to the development of in situ EPR/UV-Vis-NIR spectroelectrochemistry, which allows detailed studies of primary redox processes, as well as the consecutive reactions that take place after the electron transfer from the electrode to the molecules studied under the same experimental conditions. Thus, a various oxidation stages of a molecule can be identified. Moreover, by the kinetic measurements the reactions occurring before and after the reaction step associated with the electron and proton transfer can be monitored. The recently investigated metallocomplexes in our laboratory clearly represented a system with a substantially noninnocent character of the ligands [1-3]. Metal complexes with a noninnocent ligand exist either as a metal-ligand radical $Mn^+(L^{\cdot})$ or a higher valent metal complex $M^{(n+1)+}(L^-)$. However, for noninnocent ligands the distribution of the

electron density between the central atom and the ligand is more complex making it difficult to determine the physical/formal oxidation state of the central atom. Extended charge delocalization is typical for these complexes in different oxidation states and subtle changes of electronic structure could significantly alter the redox site within the complex. The effect of central atom on the electrochemically generated species was studied in detail by EPR/UV-vis-NIR spectroelectrochemistry and DFT calculations. Simultaneous in situ electrochemical, UV-vis-NIR and EPR measurements in conjunction with density functional theory calculations provide insights into the extent of electron delocalisation as well as spin density distribution in the investigated metallocomplexes. Variety of EPR signals were observed for one-electron oxidized Ni(II) complexes going from predominantly phenoxyl radical character with very little contribution from the d-orbitals of redox active Ni(II) to the formation of $[Ni(II/III)L]^+$ species with strong noninnocent character exhibiting a rhombic EPR signal with a large g-tensor anisotropy. We have shown that a charge delocalisation is dependent on the electronic coupling between the redox-active ligands and metal. The EPR activity of the formed species in the region of the corresponding voltammetric peaks was proved by in situ EPR spectroelectrochemistry. Interestingly, in some cases a temperature-dependent tautomerism between M(III)-phenolate and M(II)-phenoxyl radical states was observed.

Acknowledgement: The financial support of the Science and Technology Assistance Agency (the contract No. APVV-15-0053) and Slovak Grant Agency VEGA (contract No. 1/0416/17) is gratefully acknowledged.

- [1] Maria Cazacu, Sergiu Shova, Alina Soroceanu, Peter Machata, Lukáš Bučinský, Martin Breza, Peter Rapta, Joshua Telser, Jerzy Krzystek, Vladimir B. Arion, *Inorg. Chem.* 54 (2015) 5691.
- [2] Diana Dragancea, Natalia Talmaci, Sergiu Shova, Ghenadie Novitchi, Denisa Darvasiová, Peter Rapta, Martin Breza, Markus Galanski, Jozef Kožíšek, Nuno M. R. Martins, Luisa M. D. R. S. Martins, Armando J. L. Pombeiro, Vladimir B. Arion, Vanadium(V) Complexes with Substituted 1,5-bis(2-hydroxybenzaldehyde)carbohydrazones and Their Use As Catalyst Precursors in Oxidation of Cyclohexane. *Inorg. Chem.* 55 (2016) 9187.
- [3] Paul-Steffen Kuhn, Gabriel E. Buechel, Katarina K. Jovanovic, Lana Filipovic, Sinisa Radulovic, Peter Rapta, Vladimir B. Arion, *Inorg. Chem.* 53 (2014) 11130.

2P07**ANALYSIS OF COPPER COMPLEXES WITH BIOLOGICALLY ACTIVE LIGANDS**Karina Strečanská, Milan Mazur

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

In the present contribution, the properties of the copper complexes with biologically active ligands were systematically analysed. The following ligands were selected: 1) the derivatives of the chlorosalicylic acids, 3,5-di-, 4- or 5-chlorosalicylic acids ($X\text{-ClSalH}$), 2) neutral N -donor ligands, N,N' -diethylnicotinamide (denia) or 3-pyridylmethanol (ronicol). The set of samples with varying concentration (N -donor ligand-to-metal ratio, x), $[\text{Cu}(\text{ac})_2(\text{aq})]$ or $\text{CuSO}_4(\text{aq}) + 2 (X\text{-ClSalH}(\text{solv})) + x(N\text{-donor ligand}(\text{solv}))$, where $X = 3,5\text{-di-}, 4\text{-}, 5\text{-}$ and $x = 0, 2, 4, 6, 8$, were prepared. The resulting complexes were studied by EPR spectroscopy in the water/methanol (1:3 v/v) solutions at room temperature (RT). The effects of two copper(II) salts (copper acetate, $\text{Cu}(\text{ac})_2$ or copper sulphate, CuSO_4), three derivatives of the chlorosalicylic acids (3,5-diClSalH, 4-ClSalH or 5-ClSalH) and two N -donor ligands (denia or ronicol) with varying ligand-to-metal ratio on the formation of resulting complexes in the basic reaction mixture were studied. The number of nitrogens, which could be coordinated to the central $\text{Cu}(\text{II})$ ions in the equatorial plane were discussed. Such information is not possible to obtain by EPR spectroscopy of powder samples of the given copper complexes.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contact No. APVV-15-0053 and by the Scientific Grant Agency of the Slovak Republic, VEGA 1/0041/15 and VEGA 1/0686/17.

2P08**REAKCIA VYLUČOVANIA VODÍKA KATALYZOVANÁ UHLÍKOVÝMI VLÁKNAMI DOPOVANÝMI KOVOVÝMI NANOČASTICAMI**

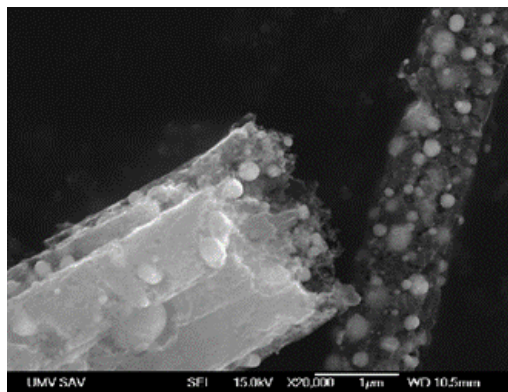
Renáta Oriňaková¹, Magdaléna Strečková², Mária Sabalová¹, Erika Múdra², Andrej Oriňak¹

¹*Katedra fyzikálnej chémie PF UPJŠ v Košiciach, Moyzesova 11, 040 01 Košice,
renata.orinakova@upjs.sk*

²*Ústav materiálového výskumu SAV, Watsonova 47, 040 01 Košice*

Vodík, ako najčistejší, obnoviteľný a udržateľný zdroj energie s minimálnym škodlivým dopadom na životné prostredie, je v súčasnosti predmetom záujmu mnohých vedcov a odborníkov. Je pravdepodobné, že vodíkové energetické systémy v budúcnosti progresívne nahradia existujúce fosílné palivá a preto je čoraz častejšie označovaný za palivo budúcnosti. Účinné a stabilné bezplatínové katalyzátory pre elektrochemickú reakciu vylučovania vodíka sú nevyhnutnou podmienkou efektívnej a udržateľnej výroby vodíka z vody [1]. Najúčinnnejšími katalyzátormi pre reakciu vylučovania vodíka sú ušľachtilé kovy, ktoré generujú vysoké prúdové hustoty pri nízkom napätí. Avšak vysoká cena a obmedzené zásoby brzdia širšiu komercializáciu elektrolytických článkov na báze platiny a smerujú aktivitu vedcov na nájdenie alternatívnych bezplatínových systémov.

Metódou elektrostatického zvlákňovania z voľného povrchu roztoku polyméru boli pripravené dlhé kontinuálne uhlíkové vlákna dopované nanočasticami kovov a fosfidov kovov (Ni, Cu a Co), ktoré preukázali vysokú stabilitu a elektrokatalytickú aktivitu v reakcii vylučovania vodíka. Výhodou tejto metódy je jej jednoduchosť, cenová dostupnosť, in situ inkorporácia nanočastíc do uhlíkových vlákien a možnosť prípravy veľkého množstva materiálu. Zvýšenie elektrokatalytickej účinnosti pripraveného materiálu je možné dosiahnuť optimalizáciou podmienok tepelnej úpravy.



Obr. 1. SEM snímka uhlíkových vlákien dopovaných nanočasticami niklu a fosfidov niklu.

Príspevok vznikol s podporou vedeckej grantovej agentúry MŠ SR vo forme grantu VEGA č. 1/0074/17 a 2/0079/17 a programu NATO Science for Peace and Security Programme vo forme grantu 985148.

- [1] Miguel Cabán-Acevedo, Michael L. Stone, J. R. Schmidt, Joseph G. Thomas, Qi Ding, Hung-Chih Chang, Meng-Lin Tsai, Jr-Hau He, Song Jin: Efficient hydrogen evolution catalysis using ternary pyrite-type cobalt phosphosulphide, *Nature Materials*, 14, 1245–1251 (2015)

2P09 REACTIONS OF COPPER (II) IN ELECTROSPRAY

Jana Jaklová Dytrtová^{1,2}, Michal Jakl³, Václav Kašíčka¹

¹ Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, v.v.i., Flemingovo náměstí 2, 166 10 Prague 6, Czech Republic, dytrtova@uochb.cas.cz

²FTVS

³Department of Agro-Environmental Chemistry and Plant Nutrition, Faculty of Agrobiological Sciences, Czech University of Life Sciences Prague, Kamýcká 129, 165 21 Prague – Suchbátka, Czech Republic

Copper behaviour under conditions present during the electrospray process is influenced by the type of the ligand as well as by the type of solvent. Cu(II) reduces to Cu(I) during the nebulisation process if the ligand is neutral or the number of ligands is smaller than four [1, 2]. However the manner how the type and number of ligands influence the Cu(II) reduction is not satisfactorily described. The contribution is dedicated to description of Cu(II) reactivity under the electrospray condition in the gas phase within the regard to broad variety of organic ligands.

- [1] A. Tintaru, L. Charles, P. Milko, J. Roithová, D. Schröder, *J. Phys. Org. Chem.* **2009**, 22, 229.

- [2] J. Jaklová Dytrtová, M. Jakl, D. Schröder, E. Čadková, M. Komárek, *Rapid Commun. Mass Spectrom.* **2011**, 25, 1037.

2P10 REDUKCE ARSENIČNANŮ A ARSENITANŮ POMOCÍ NULAMOCNÉHO ŽELEZA: ÚČINNÁ STRATEGICKÉ ODSTRANĚNÍ ARSENU Z VODY

Jan Kolařík¹, Robert Pucek¹, Jiří Tuček¹, Jan Filip¹, Martin Petr¹, Virender K. Sharma¹, Radek Zbořil¹

¹Regionální Centrum Pokročilých Technologii a Materiálů, Katedra Fyzikální Chemie a Experimentální Fyziky, Přírodovědecká Fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc, Česká Republika

Arseničnany [As(V)] a arsenitany [As(III)] jsou pro člověka karcinogenní a jejich odstranění ze znečištěných vod je prováděno nejčastěji pomocí sorbčních technik. Tyto sorbční metody však mohou vést k sekundárnímu uvolňování slabě vázaných sloučenin arsenu. Zároveň efektivita běžně dostupných sorbentů není velká a proto je zapotřebí použít značné množství materiálu. Zde představujeme průlomovou metodu použití nulomocného železa (nZVI) bez povrchové stabilizace slupkou oxidů železa(III) (OSF-nZVI). Za anaerobních podmínek je OSF-nZVI schopen redukovat As(III) a As(V) na nulomocný arsen [As(0)] (až 65% celkového arzenu). Redukce tedy synergicky přispívá k sorpci, čímž se zvyšuje efektivita odstranění arsenu z anoxického vodního prostředí. Ještě důležitější je, že sloučeniny arsenu jsou uzavřeny mezi jádrem Fe(0) a vnějším slupkou oxidu železa(III). Pro srovnání, schopnost OSF-nZVI odstranit As(III) a As(V) v oxických podmínkách je 2krát nižší. Díky celkovému redoxnímu mechanismu za oxidických podmínek, dochází pouze k sorpci As(III) a As(V) na povrch oxidovaných částic OSF-nZVI. Tato jedinečná technologie odstranění arseničnanů a arsenitanů, jejich redukce na nulomocný arzen a zabudování ve struktuře, byl také prokázán v experimentech s reálnými znečištěnými vodami. Výsledky naznačují, že redukce a strukturní zabudování toxických druhů arsenu pomocí OSF-nZVI by mohla poskytnout velmi účinný nástroj pro čištění podzemních vod znečištěných arsenem, s ohledem na šetrnost k životnímu prostředí [1,2,3].

Poděkování autorů patří podpoře z interního studentského grantu (IGA PrF 2016 10) Univerzity

Palackého v Olomouci a také Technologické agentury ČR “Centrum kompetence” (TE01020218).

- [1] R. Prucek et al. EST, 47 (2013).
- [2] R. Prucek et al. EST, 49 (2015).
- [3] J. Tuček et al. Sustainable Chem. Eng., (2017).

2P11

THE VOLUMETRIC STUDIES OF SELECTED ELECTROLYTES IN MIXTURES OF WATER WITH ALKOXYALCOHOLS

Zdzisław Kinart¹

¹*Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemistry, University of Lodz, 90 – 236 Lodz, Pomorska 163/165, Poland*

Density values of selected electrolytes (NaBr, NaCl, KCl and KBr) in aqueous solutions of alkoxyalcohol were determined using an Anton Paar (DMA 5000) precision densimeter, at $T = 298.15$ K. The obtained results were used to calculate the apparent molar volumes $V_{\phi}^{\pm}$. Changes in the values of apparent molar volumes of the studied salts were analyzed as a function of composition of binary mixtures water + alkoxyalcohol (in the range of 0 to 30 mole % of alkoxyalcohol).

The differences in the apparent molar volume were also determined after taking into account or without taking into account the approximation as a function of the composition of the studied mixtures.

All presented results were discussed from the point of view of intermolecular interactions in the analyzed mixtures.

2P12

POKROČILÁ ANALÝZA DISOLUČNÍCH DAT

Daniel Švadlák, Josef Chmelař, Veronika Štěpánková, Kristýna Lipenská, Vladimír Velebný

*Contipro, a.s., Dolní Dobrouč 401, 561 02 Dolní Dobrouč, Česká republika
daniel.svadlak@contipro.com*

Při hledání vhodného disolučního profilu popisujícího uvolňování aktivní látky z polymerní

matrice pro systém oktenidin-kyselina hyaluronová jsme se setkali s neúspěšnou aplikací klasických disolučních modelů včetně běžně používaného Higuchiho modelu nebo modelu Korsmeyer-Peppas [1]. Toto naznačuje, že proces uvolňování je složitý a může být ovlivněn více ději (difuze, desorpce, botnání, degradace). Problematika byla řešena aplikací čtyřparametrového modelu, který obsahuje část popisující difuzní procesy uvolňování (vychází z výše uvedených klasických modelů) a část popisující procesy, které nejsou řízeny difuzí (degradace aplikační formy atd.). Aplikace modelu bude ukázána na konkrétních datech systému oktenidin-kyselina hyaluronová v různých médiích a různých aplikačních formách (vlákno, netkaná textilie, tenký film). Jako míra vhodnosti modelu byly zvoleny pokročilý koeficient determinace a Akaikeho informační kritérium (AIC). Zvolený postup umožňuje rozložení naměřených dat disoluce na jednotlivé složky modelu. Dostáváme pak informaci o průběhu difuzní a nedifuzní složky v čase, což může být poměrně užitečné při porovnání jednotlivých aplikačních forem. Z difuzní části modelu je možné za předem definovaných podmínek a znalostí parametrů rozhraní určit hodnotu difuzního koeficientu. Aplikace tohoto modelu je vhodná pro popis systémů kontrolovaného uvolňování aktivní látky z degradabilní nebo nedegradabilní polymerní matrice.

- [1] Paulo Costa, José Manuel Sousa Lobo: European Journal of Pharmaceutical Sciences 13, (2001) 123-133.

PREDNÁŠKY - SEKCIA 3: NANOMATERIÁLOVÁ CHÉMIA

3P01

BIOMEDICAL APPLICATION OF CARBON QUANTUM DOTS

Zoran Markovic

*Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences,
Dubravska Cesta 9, Bratislava, Slovakia
zoran.markovic@savba.sk*

As a new concept of cancer and microbe treatment, photodynamic therapy (PDT) attracted a great attention in the last few decades. Opposite to classical treatments such as surgery, chemotherapy and radiotherapy, PDT shows certain advantages considering that it is non-invasive, localized treatment of lesion with fewer side effects and low systemic toxicity. This therapy is based on the localized formation of reactive oxygen species (ROS) in the presence of photoactive compounds-photosensitizer (PS) under the influence of visible light.

Even though some PS have been approved for clinical use, main obstacles in the wider application of PDT are drawbacks of these compounds such as: poor water solubility, low yield of produced singlet oxygen and other ROS, limited photostability as well as inability to absorb the light wavelength above 700 nm where the skin is most transparent. Thus, PDT agents resistive to photobleaching, non-toxic, soluble in water with ability for high singlet oxygen production are highly desirable.

In this presentation we will summarize and discuss the possibilities of application of carbon quantum dots (CQD) as agents for PDT. Considering their biocompatibility, photostability and optical properties, CQD seem to be good candidates as a photosensitizer. This lecture critically compares and discusses current state-of-the-art use of CQD in PDT. We will analyze structural, morphological and optical properties of these nanomaterials as well as the mechanisms responsible for their photosensitization and ROS production.

Acknowledgement. This research was supported by the SASPRO Programme project 1237/02/02-b. The research leading to these results has received funding from the People Programme

(Marie Curie Actions) European Union's Seventh Framework Programme under REA grant agreement No. 609427.

3P02

ERADIKACE INTRACELULÁRNĚ PERZISTUJÍCÍCH BAKTERIÍ POMOCÍ NANOČÁSTIC

Jiří Trousil¹, Jana Matějková², Zdeňka Syrová³, Oto Pavliš⁴, Petr Štěpánek¹, Martin Hrubý¹

¹ Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v. v. i.
Heyrovského náměstí 2, 162 06 Praha 6, Česká republika

jiri.trousil@centrum.cz

² Ústav lékařské mikrobiologie 2. LF UK a FN Motol,
V Úvalu 84, 150 06 Praha 5, Česká republika

³ Ústav biologie a lékařské genetiky 1. LF UK a VFN,
Albertov 4, 128 01 Praha 2, Česká republika

⁴ Centrum biologické ochrany, Vojenské zařízení 6848,
561 66 Těchonín, Česká republika

Navzdory dostupnosti široké škály antibiotik se dnes stále setkáváme s obtížně léčitelnými bakteriálními onemocněními. Typickým příkladem těchto původců jsou intracelulárně perzistující bakterie (např. *Mycobacterium tuberculosis*, *Legionella pneumophila* aj.), které si během koevoluce s hostitelem vyvinuly řadu mechanismů umožňujících jejich přežití v hostitelských buňkách, typicky v makrofázích. Obtížná léčitelnost je tak dána zejména faktem, že bakterie nacházející se v makrofázích unikají přirozené obraně našeho organismu a dosahu konvenční léčby.

Makrofágy mají ze své podstaty tendenci pohlcovat kromě bakteriálních buněk i nanostruktury. Nanotechnologie tak představuje jeden z relativně nových přístupů pro dopravu účinných látek do hostitelských buněk.

V rámci příspěvku bude diskutován modelový systém založený na biodegradovatelných a biokompatibilních MPEO-*b*-PCL nanočásticích s enkapsulovaným antituberkulotikem rifampicinem a jeho potenciál pro eradikaci infekce způsobené buňkami *M. tuberculosis*, který byl prokázán *in vitro* na modelu myších makrofágů.

Tato práce vznikla za podpory grantů GA ČR 17-07164S a 17-09998S.

3P03**MULTIPLEXNÍ ANALÝZA NÁDOROVÝCH MARKERŮ HER2 A EPCAM V LIDSKÉ KRVÍ POMOCÍ NANOKOMPOZITU $\text{Fe}_2\text{O}_3@ \text{Ag}$ A MAGNETICKY ASISTOVANÉ POVRCHEM ZESÍLENÉ RAMANOVY SPEKTROSKOPIE (MA-SERS)**

Anna Balzerová, Ariana Fargašová, Václav Ranc, Radek Zbořil

*Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, Olomouc, 771 46, Česká republika
anna.balzerova@upol.cz*

Rakovina je celosvětově hlavní příčinou úmrtí a z tohoto důvodu je velmi důležité vyvíjet metody umožňující detekci nádorových markerů v různých klinických vzorcích, jako je například krev [1]. Jednou z vhodných možností multiplexní detekce rakoviny je povrchem zesílená Ramanova spektroskopie, popřípadě její modifikace, takzvaná magneticky asistovaná povrchem zesílená Ramanova spektroskopie (MA-SERS). Tato metoda byla využita ke kompetitivní simultánní detekci dvou markerů rakoviny HER2 a EpCAM. Jako biosensor byl použit magnetický nanokompozit $\text{Fe}_3\text{O}_4@ \text{Ag}$ funkcionalizovaný protilátkami (Anti-HER2, Anti-EpCAM). Navržená metoda byla založena na kompetici mezi chemicky značenými referenčními markery (Her2_Cy3 a EpCAM_Cy5) a neozačenými markery a byla použita pro detekci vybraných markerů v lidské plné krvi. Analýza vzorků krve byla statisticky vyhodnocena za použití Studentova t-testu. Díky magnetickým nanočásticím, které umožňují rychlou prekoncentraci analytu pomocí vnějšího magnetického pole a jednoduchou separaci cílených látek od komplexní matrice, představuje aplikace MA-SERS atraktivní alternativu k ostatním metodám (elektrochemické metody nebo SERS) používaných při multiplexní detekci.

Tato práce vznikla za finanční podpory projektu LO1305 Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky, projektů IGA_PřF_2017_025, CZ.1.07/2.3.00/30.0004 a výzkumné infrastruktury NanoEnvicZ (projekt LM2015073).

- [1] Torre, L. A.; Siegel, R. L.; Ward, E. M.; Jemal, A. Global Cancer Incidence and Mortality Rates and Trends. *Cancer Epidemiol. Biomarkers Prev.* **2016**, 25 (1), 16–27.

3P04**ELEKTROCHEMICKÁ DETEKCIA INZULÍNU NA MIRKOELEKTRÓDACH MODIFIKOVANÝCH NANOČASTICAMI**

Ivana Šišoláková¹, Jana Hovancová¹, Renáta Oriňáková¹, Andrej Oriňák¹

¹*Univerzita Pavla Jozefa Šafárika, Prírodovedecká fakulta, Šrobárová 2, 041 54, Košice
sisolakova.ivana@gmail.com*

Diabetes predstavuje jedno z najrozšírejších svetových ochorení. Vzhľadom k rapidnému nárastu pacientov trpiacich týmto ochorením je potrebná včasná, rýchla a finančne nenáročná diagnostika inzulínu a glukózy v krvi pacienta. V súčasnej dobe sa na stanovenie týchto analytov používajú elektrochemické biosenzory, ktorých použitie je limitované vlastnosťami biologickej zložky. Preto sa v poslednom období kladie dôraz na vývoj efektívneho elektrochemického senzora bez biologickej aktívnej zložky. Tento príspevok je zameraný na elektrochemické stanovenie inzulínu na zlatých mikroelektrodách modifikovaných zlatými nanočasticami (AuNPs) a kombináciou AuNPs a uhlíkových nanotrubičiek (CNTs), čím došlo k zväčšeniu aktívnej plochy zlatej mikroelektrody. V prípade modifikácie pomocou AuNPs o 42% a v prípade modifikácie kombináciou CNTs a AuNPs o 183%. Na nemodifikovanej a modifikovaných zlatých mikroelektrodách boli stanovované koncentrácie inzulínu v rozmedzí 0,597 μM – 2,985 μM , pričom bola snaha dosiahnuť čo najlineárnejšiu koncentračnú závislosť maximálnej hodnoty prúdu od koncentrácie, potrebnú pre budúce stanovenia neznámych koncentrácií inzulínu. Z vykonaných meraní boli vyhotovené kalibračné krivky a bol určený korelačný koeficient potrebný na porovnanie linearity závislostí. V našom prípade došlo modifikáciou nanočasticami k zvýšeniu korelačného koeficientu v porovnaní s korelačným koeficientom určeným pre nemodifikovanú mikroelektrodu.

Táto práca vznikla na základe podpory grantov VEGA 1/0074/17Vedeckej grantovej agentúry a APVV-16-0029, Agentúry na podporu výskumu a vývoja.

3P05

PŘEDOPERAČNÍ DIAGNOSTIKA INFEKČÍ KLOUBNÍCH NÁHRAD METODOU MAGNETICKY ASISTOVANÉ POVRCHEM ZESÍLENÉ RAMANOVY SPEKTROSKOPIE (MA-SERS)

Ariana Fargašová¹, Anna Balzerová¹, Robert Prucek¹, Miroslava Htoutou Sedláková², Kateřina Bogdanová², Jiří Gallo³, Milan Kolář², Václav Ranc¹, Radek Zbořil¹

¹Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, Olomouc, 771 46, Česká republika
ariana.fargasova@upol.cz

²Ústav mikrobiologie, Lékařská fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Hněvotínská 3, 775 15 Olomouc, Czech Republic

³Ortopedická klinika, Lékařská fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, I. P. Pavlova 6, 779 00 Olomouc, Czech Republic

Rychlé a přesné odhalení infekce kloubních náhrad (dále jen IKN) je nezbytné pro racionální a efektivní léčbu tohoto stavu z praktického hlediska. Doposud bylo vyvinuto několik diagnostických testů (např. polymerázová řetězová reakce), které umožňují rozlišení mezi infikovanými a neinfikovanými případy [1]. Nicméně, žádný diagnostický test neposkytuje 100% senzitivitu a 100% specificitu, přičemž se tak často naráží na problém časové náročnosti a spolehlivosti diagnostiky širokého spektra klinických projevů IKN. Nové možnosti pro detekci a identifikaci IKN, založené na magneticky asistované povrchem zesílené Ramanově spektroskopii (MA-SERS) nabízejí magnetické nanočástice modifikované streptavidinem (MNP@Strep), jejichž povrch byl funkcionalizován příslušnými protilátkami a následně konjugován s nanočásticemi stříbra. Vysokou účinnost navrženého biosenzoru demonstruje diagnóza infekcí způsobených dvěma bakteriálními kmeny, které jsou běžně spojovány s IKN, jako je *Staphylococcus aureus* a *Streptococcus pyogenes*. Ověření účinnosti vybraného diagnostického nástroje bylo prokázáno na modelových vzorcích bakteriálních lyzátů a následně na reálných vzorcích získaných punkční aspirací kolenního kloubu, které byly inokulovány s živými patogenními buňkami. Tento přístup poskytuje jednoduchý, rychlý a levný test, což z něj činí potenciálně atraktivní alternativu k zavedeným diagnostickým technikám, které jsou založeny na časově náročných tradičních kultivačních technikách.

Tato práce vznikla za finanční podpory projektu LO1305 Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky, projektů IGA_PřF_2017_025 a IGA_LF_2017_009 Univerzity Palackého v Olomouci, výzkumné infrastruktury NanoEnvicZ (projekt LM2015073) a projektu AZV VES 15-27726A Ministerstva zdravotnictví České republiky.

[1] J. Kordelle, H. Hossain, U. Stahl, I. Schleicher, H. Haas: Z. Orthop. 142, 571–576 (2004)

3P06

NANOROZMERNÉ STRIEBORNÉ VRSTVY V SKRÍNINGOVEJ SERS ANALÝZE ZÁVAŽNÝCH OCHORENÍ

Zuzana Orságová Kráľová¹, Andrej Oriňák¹, Renáta Oriňáková¹, Jozef Radoňák², Lucia Lakyová², Ondrej Petruš¹, Erika Múdra³, Oleg Shylenko⁴

¹Katedra fyzikálnej chémie, PF UPJŠ v Košiciach, Moyzesova 11, 040 01 Košice

²I. Chirurgická klinika, Fakultná univerzita L. Pasteura, Trieda SNP 1, 040 01 Košice

³Ústav materiálového výskum SAV, Watsonova 47, 040 01 Košice

⁴Katedra fyziky kondenzovaných materiálov, PF UPJŠ v Košiciach, Park Angelinum 9, 041 54 Košice

Včasná a presná diagnostika rakovinových ochorení je základným predpokladom pre úspešnú liečbu. Spojením povrchom zosilnenej Ramanovej spektroskopie (SERS) a elektrochemicky pripravených strieborných tenkých vrstiev, získame rýchlu, spoľahlivú a finančne nenáročnú diagnostickú metódu v onkológii. Nanotechnologický postup elektrochemickej prípravy nanoobjektových vrstiev umožňuje jednoduché ovplyvňovanie výslednej morfológie striebornej nanotextúry. Vhodne zvolenou morfológiou SERS povrchu je možné dosiahnuť maximálne zosilnenie signálu.

Pulznou bipotenciostatickou metódou sme pripravili strieborné filmy, ktorých SERS funkcionalitu sme otestovali modelovým analytom Rodamínom 6G. Na optimalizovaných SERS vrstvách sme analyzovali krvnú plazmu od pacientov s diagnostikovanou rakovinou hrubého čreva. Zvolili sme najvhodnejšie riedenie krvnej plazmy v pomere 1:9 s ultračistou vodou a stanovili vlnovú dĺžku použitého laseru na 785 nm. Pomocou nami pripravených strieborných filmov sme boli schopní detegovať jednotlivé zložky krvnej plazmy. Substitúciou doteraz používaných strieborných koloidných nanočastíc pri SERS analýze biologických analytov je eliminovaná neželaná agregácia nanočastíc. Taktiež je vynechaný medzikrok miešania

koloidných častíc so vzorkou a jej následná inkubácia, čím sa diagnostika výrazne urýchli.

Na základe porovnania posunov a intenzít signifikantných Ramanových pásov v SERS spektrách krvnej plazmy od pacientov s kolorektálnym karcinómom a od zdravých dobrovoľných darcov budeme schopní validovať diagnostickú metódu založenú na PCA analýze. Na jej základe bude možné s vysokou spoľahlivosťou od seba rozdeliť sledované skupiny, štatisticky vyhodnotiť a zaradiť každú novo nameranú vzorku do príslušnej skupiny.

Táto práca vznikla za finančnej podpory grantov MŠ SR VEGA 1/0074/14; APVV-16-0029. Ďakujem aj Výboru SCHS za poskytnutie finančných prostriedkov, aj vďaka ktorým som sa mohla zúčastniť na 69. Zjazde chemikov.

3P07

NANOČÁSTICE PRO DISPERZNÍ MAGNETICKOU SEPARACI

Jakub Koktan^{1,2}, Ondřej Kaman¹, Pavel Řezanka²

¹Fyzikální ústav AV ČR, v.v.i., Na Slovance 1999/2, 182 21 Praha
koktan@fzu.cz

²Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, ústav analytické chemie, Technická 5, 166 28 Praha

Magnetické nanočastice (MNP) v súčasnosti predstavujú fascinujúci materiál s mnoha potenciálnymi aplikaciami. Najčastejšie je citované využitie v medicíne, kde jsou MNP použity jako kontrastní látky pro MRI, nosiče léčiv, protředky pro magnetickou fluidní hypertermii a jiné. Nicméně, magnetické mikro a nanočastice našly i uplatnění jako disperzní pevné fáze sorbující a koncentrující důležité analyty nebo polutanty z různých maticí [1]. Princip magnetické disperzní separace spočívá v rozptýlení vhodných částic v médiu, sorpci látek na povrch a následné separaci pevné fáze pomocí magnetického pole. Tato práce se zabývá syntézou, charakterizací a sorpčními vlastnostmi sférických nanočástic ZnFe_2O_4 o průměru asi 15 nm, které jsou modifikovány vrstvou pyrolitického grafitu. Nanočastice jsou získány metodou termální dekompozice [2] a grafitická vrstva zahříváním částic obsahující korónu organických prekursorů v inertní atmosféře. Materiál je komplexně charakterizován elektronovou mikroskopií, termogravimetrickou analýzou, magnetickými měřeními, rentgenovou difrakcí a dalšími technikami. Sorpční vlastnosti jsou demonstrovány na separaci klasického

steroidního hormonu a rizikového polutantu v životním prostředí β -estradiolu. Dále je diskutováno zakoncentrování a opětovném uvolnění estradiolu z povrchu adsorbentu. Kvantifikace sorpční kapacity je provedena UV-Vis absorpční spektrometrií.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č. 20-SVV/2017).

- [1] M. Ahmadi, H. Elmongy, T. Madrakian, M. Abdel-Rehim, Nanomaterials as sorbents for sample preparation in bioanalysis: A review, Anal. Chim. Acta. 958 (2017) 1–21. doi:10.1016/j.aca.2016.11.062.
- [2] W.W. Yu, J.C. Falkner, C.T. Yavuz, V.L. Colvin, Synthesis of monodisperse iron oxide nanocrystals by thermal decomposition of iron carboxylate salts, Chem. Commun. (2004) 2306. doi:10.1039/b409601k.

3P08

GRAFÉN OXIDOVÝ BIOSENZOR NA DETEKCIU ONKOLOGICKÝCH CHORENÍ

Nikola Bugárová¹, Michal Bodík², Peter Šiffalovič², Matej Mičušík¹, Zdeno Špitálsky¹, Vlasta Závistová³, Martina Konarecká³, Miriam Zaťovičová⁴, Silvia Pastoreková⁴, Mária Omastová¹

¹Ústav polymérov, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, Slovensko
nikola.bugarova@savba.sk

²Fyzikálny ústav, Dúbravská cesta 9, 845 11 Bratislava, Slovensko

³Ústav experimentálnej fyziky, Watsonova 47, 040 01 Košice, Slovensko

⁴Virologický ústav BMC, Dúbravská cesta 9, 845 05 Bratislava, Slovensko

Od objavu v roku 2004, sa stali grafén a grafén oxid intenzívne študovanými materiálmi v súvislosti s viacerými zaujímavými možnosťami aplikácie, siahajúcimi od elektrických zariadení, fotovoltaike až po biosenzory [1].

Grafén oxidové nanočastice obsahujú na svojom povrchu ako aj na okrajoch funkčné skupiny kyslíka. Pre naše štúdium sme GO pripravili modifikovanou Hummer a Offemanovou reakciou z grafitu. Základné charakteristiky GO a redukovaného GO (rGO), stupeň oxidácie, úspešnosť defoliácie a veľkosť častíc boli skúmané fyzikálnymi a chemickými analýzami, pomocou röntgenovej fotoelektrónovej spektroskopie (XPS), Ramanovej spektroskopie a atomárnej silovej mikroskopie (AFM). V súčasnosti sú intenzívne študované biosenzory na báze grafénu, ktorých najmä hydrofilný

charakter GO umožňuje výrobu spoľahlivých, vysoko citlivých a ultrarýchlych biosenzorových nanoplatformiem. Veľkosť používaných GO vrstiev sa pohybuje v rozmedzí od niekoľkých mikrónov až po 100 nm. Pre prípravu biosenzorov je veľkosť nanočastíc dôležitá, vzhľadom na uvažovaný prechod cez biologické bariéry ako sú bunkové membrány.

Pripravili sme GO nanoplatformu funkcionizovanú magnetickými nanočasticami (MNPs), pomocou amidickej väzby, rovnako sme naviazali monoklonálnu protilátku špecifickú pre enzým karbonická anhydráza IX (CA IX). CA IX je enzým indukovaný hypoxiou na povrchu buniek, ktorý je exprimovaný v agresívnych nádoroch, a preto ho možno použiť ako biomarker nádoru [2].

Prvé testy ukázali, že je možné detegovať čistý GO v bunke pomocou Ramanovej spektroskopie a po úspešnej modifikácii GO nanočasticami a protilátkou bolo možné zdetegovať pripravenú funkčnú nanoplatformu označenú fluorescenčnou farbičkou v prostredí buniek pomocou konfokálneho mikroskopu.

Pod'akovanie. Táto práca bola podporovaná Agentúrou pre výskum a vývoj na základe Zmluvy č. APVV-14-0120.

- [1] Novoselov, K., et al.: Nature, 490, 192-200 (2012).
- [2] Pastorekova, S., Casini, A., Scozzafava, A., Vullo, D., Pastorek, J., Supuran, C.T. Bioorganic Med. Chem. Letters, 14, 869-873 (2004).

3P09

TWO STAGE TUMOR DIAGNOSTICS BASED ON HYDROXYAPATITE NANOPARTICLES WITH POLYMER CORONA

Volodymyr Lobaz^{*1}, Zbynek Novy², Sona Gurska², Michal Sakmár³, Ekaterina Kukleva³, Martin Vlk³, Ján Kozempel³, Milos Petrik², Martin Hruby¹.

¹Institute of Macromolecular Chemistry AS CR, Heyrovskeho sq. 2, 162 06 Prague, Czech Republic. *

²Institute of Molecular and Translational Medicine, Palacky University, Hnevotinska 5, 77900 Olomouc, Czech Republic

³Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, Czech Technical University in Prague, Brehova 7, 115 19 Prague, Czech Republic
lobaz@imc.cas.cz

The novel two-stage system for vizualization of solid tumors was developed on the platform of biocompatible hydrophilic polymers-coated hydroxyapatite nanoparticles. In the first stage the nanoparticles, that circulate in the bloodsteram

are expected to accumulate in the solid tumors by Enhanced Permeation and Retention (EPR) effect [1]. Later the imaging agent, either fluorescent dye or radioactive isotope is injected and expected to bind the surface of nanopartricles, making their vizualization possible.

We use hydroxyapatite nanoparticles of average hydrodynamic diameter 60 nm and various bone seeking agents that bing both the surface of bones and hydroxyapatite nanoparticles. To provide long-enough circulation of hydroxyapatite in the bloodstream they are coated with hydrophilic polymer corona, comprising of tailored poly(ethylene oxide), poly(2-ethyl-2-oxazoline) or poly[N-(2-hydroxypropyl) methacrylamide], respectively, with hydroxybiphosphonate end group, serving the anchor for particles surface. Despite the particles are covered with polymer layer, they preserve the capacity for loading the surface with low-molecular-weight imaging agents. The surface of particles was additionally functionalized with fluorescein hydroxybisphosphonate adduct and ^{99m}Tc-oxidronate. *In vitro* stability of labeled nanoparticles was tested in saline and human plasma up to 24h after incubation. Biodistribution of radiolabeled particles was studied in normal Balb/c mice using SPECT/CT imaging system.

The authors acknowledge financial support from the Ministry of Health of the Czech Republic (grant # 16-30544A).

- [1] Nakamura H, Jun F, Maeda H (2015) Expert Opin Drug Deliv 12(1):53

3P10

KATALYTICKÁ AKTIVITA NANOČÁSTIC KOVŮ – MODEL A MODELOVÉ REAKCE

Libor Kvítek, Aleš Panáček, Robert Prucek, Šárka Hradilová, Lucie Hochvaldová, Petr Suchomel

Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů a Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. Listopadu 12, 771 46 Olomouc, Česká republika
libor.kvitek@upol.cz

Výjimečné vlastnosti kovových nanomateriálů se mimo jiné projevují i v jejich výrazně vyšší katalytické aktivitě ve srovnání se stejným kovem ale v částicích rozměru mikrometrů a větších. Pro první posouzení katalytické aktivity připravených nanočastic se ve výzkumných laboratořích používají modelové reakce, umožňující jednoduché provedení experimentu a snadné

srovnání s katalytickou aktivitou jiných částic díky existenci řady studií využívajících stejnou modelovou reakci. Pro redox reakce se nejčastěji používají dvě modelové reakce – redukce methylenové modře tetrahydridoboritanem sodným [1] nebo redukce nitrofenolu stejným redukčním činidlem. [2] Studium kinetiky obou reakcí je usnadněno absorpcí světla obou výchozích látek ve viditelné oblasti a tudíž možnost využití spektrofotometrie pro sledování průběhu reakce. Další pozitivum představuje jednoduchý průběh obou reakcí bez komplikací reakčního mechanismu bočnými reakcemi, které jsou jinak u reakcí organických molekul velmi časté. V případě přebytku redukční látky se celá kinetika obvykle zjednodušuje na kinetiku reakce 1. řádu a díky platnosti Lambert-Beerova zákona pro obě látky v širokém rozsahu koncentrací je její vyčíslení úkolem snadno zvládnutelným i pro studenta na bakalářském stupni studia chemie. Získání primárních kinetických dat je tak snadné i ve standardně vybavené chemické laboratoři.

Přes uvedenou jednoduchost realizace a získání primárních dat z kinetických experimentů s těmito modelovými reakcemi se ovšem v literatuře objevuje mnoho rozporů, které znesnadňují srovnání publikovaných katalytických aktivit připravených nanomateriálů. Typický případ představuje problém vyhodnocení závislosti katalytické aktivity na velikosti nanočástic – výsledné závislosti se zásadně liší pokud je katalytický experiment realizován s konstantním objemem či naopak s konstantním povrchem katalytických částic v reakčním systému. Další problém představuje aplikace klasických modelů heterogenní katalýzy. Nejčastěji používaný model podle Langmuira a Hinshelwooda předpokládá adsorpci obou reakčních komponent na povrchu katalytické částice, méně často zmiňovaný model podle Eleyho a Rideala pouze jedné z reakčních komponent. Každý z těchto modelů poskytuje rovněž rozdílné závislosti katalytické aktivity nanočástic na jejich povrchu. Samozřejmě nejen tyto dva základní problémy komplikují vyhodnocení a srovnání kinetických dat sloužících jako základní ukazatel katalytické aktivity připravených nanočástic. Rozborem těchto problémů na příkladech z literatury i vlastní experimentální praxe se proto bude zabývat tato přednáška s cílem hledání optimálního postupu hodnocení katalytické aktivity kovových nanomateriálů na základě objektivních a jednoznačných kritérií.

Autoři děkují za finanční podporu projektu vnitřního grantu UP Olomouc IGA_PrF_2017_025.

- [1] Panacek A., Pucek R., Hrbac J., Nevecna T., Steffkova J., Zboril. R., Kvitek L.: Chemistry of Materials 26, 1332 (2014).
- [2] Praus P., Turicova M., Karlikova M., Kvitek L., Dvorsky R.: Materials Chemistry and Physics 140, 493 (2013).

3P11

Ni NANOKAVITOVÉ FILMY DEKOROVANÉ Ag NANOČASTICAMI PRE SERS APLIKÁCIE

Ondrej Petruš¹, Andrej Oriňak¹, Renáta Oriňaková¹,
Zuzana Orságová Kráľová¹, Miriam Kupková², Erika
Múdra²

¹*Katedra fyzikálnej chémie, PF UPJŠ v Košiciach,
Moyzesova 11, 040 01 Košice*

²*Ústav materiálového výskum SAV, Watsonova 47,
040 01 Košice*

V súčasnej dobe sa mnoho výskumných skupín zaoberá prípravou plazmónových substrátov pre SERS aplikácie. Ich výhodou je extrémne zosilnenie intenzity Ramanovho signálu, ku ktorému dochádza v dôsledku vybudenia povrchových plazmónov. Intenzita generovaných plazmónov závisí ako od geometrie tak aj od materiálu z ktorého je nanoštrukturovaná vrstva pripravená.

Vhodným substrátom pre SERS aplikácie sú nanokavitové filmy pripravené koloidnou litografiou s následnou elektrochemickou depozíciou kovového filmu. Zaoberáme vplyvom veľkosti koloidných častíc použitých na prípravu koloidnej masky, hrúbky Ni vrstvy a dobou depozície Ag na zosilnenie intenzity Ramanovho signálu. Veľkosť koloidných častíc bola 100, 300, 500, 700 a 900 nm. Hrúbka Ni vrstvy dosahovala polomer koloidných častíc a doba depozície Ag bola 200 s pri prúdovej hustote 1.10^{-3} A.cm⁻². Najvyššie intenzity Ramanovho signálu boli pozorované ak boli použité 500 nm PS guľičky na zhotovenie koloidnej masky. Následnou moduláciou normalizovanej výšky (výška Ni filmu / priemer použitých koloidných častíc) Ni filmu boli najvyššie intenzity zaznamenané pri normalizovanej výške ~0,5. Optimálna doba depozície Ag bola 200 s kedy Ag nanočastice homogénne a s vysokou hustotou dekorovali Ni nanokavitový film. Faktor zosilnenia pre optimalizovaný Ni/Ag nanokavitový film dosahoval hodnotu $1,078.10^{10}$ pre Rodamín 6G. Dôležitým parametrom je aj závislosť intenzity signálu od koncentrácie a časová stabilita

povrchov, kde koeficient R^2 dosahoval hodnotu 0,95 v rozmedzí koncentrácií Rodamínu 6G od $1 \cdot 10^{-5}$ po $1 \cdot 10^{-12}$ mol.dm⁻³ a časová stabilita bola preukázaná po dobu 13tich týždňov.

Táto práca vznikla za podpory grantov VVGS-PF-2016-72637 a MŠ SR: VEGA 1/0074/14; APVV-16-0029

3P12

SONOCHEMICKÁ PŘÍPRAVA VRSTEV ČÁSTIC STŘÍBRA NA SKLENĚNÉM PODKLADU PRO ÚČELY POVRCHEM ZESÍLENÉ RAMANOVY SPEKTROSKOPIE

Robert Prucek, Petr Suchomel, Aleš Panáček, Linda Wagnerová, Libor Kvítek

*Regionální Centrum Pokročilých Technologii a Materiálů, Katedra fyzikální chemie, Univerzita Palackého v Olomouci, Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc, Česká Republika
robert.prucek@upol.cz*

Povrchem zesílená Ramanova spektroskopie (SERS) je velmi rychlá, citlivá, selektivní spektroskopická technika, umožňující detekci či identifikaci různých molekul, které jsou adsorbovány na zdrsňeném povrchu kovů nebo na povrchu koloidních částic vybraných kovů, kde může docházet k zesílení Ramanova rozptylu více než 10^7 krát.¹ Povrchem zesílená Ramanova spektroskopie měla obrovský význam pro vědní obory, díky její vysoké citlivosti a nemalému rozsahu možných aplikací v biologii, lékařství a při analýze chemických struktur.² Pro efektivní využití SERS je důležité připravit vhodný substrát, který by měl být stabilní, snado a reprodukovatelně připravitelný. Tato studie se zabývá přípravou nanostruktur stříbra na skleněném podkladu za účelem jejich aplikace v oblasti povrchem zesílené Ramanovy spektroskopie. Vrstvy částic stříbra na skleněných krycích sklíčkách byly připravovány redukcí diaminstříbrného komplexu vybranými redukčními činidly (maltosa, glukosa, ethylnglykol, glycerol) za současného působení výkonného ultrazvuku. V rámci provedené studie bylo testováno několik modifikací přípravy vedoucích k ovlivnění struktury a kvality výsledných vrstev. Vybrané nanostrukturované vrstvy stříbra byly následně testovány pro aplikaci v oblasti povrchem zesílené Ramanovy spektroskopie.

Práce vznikla za finanční podpory projektu LO1305 Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České

republiky, projektu 15-22248S Grantové agentury České republiky a projektu AZV VES 15-27726A Ministerstva zdravotnictví České republiky.

[1] Xie, W.; Schlucker, S.: Phys.Chem. Chem. Phys., **2013**, 15, 5329.

[2] Tian, Z. Q.: Journal of Raman Spectroscopy, **2005**, 36, 466-470.

3P13

VLIV REDOXNÍHO POTENCIÁLU REDUKČNÍ LÁTKY NA SYNTÉZU NANOČÁSTIC STŘÍBRA

Lucie Hochvaldová¹, Libor Kvítek¹

¹Univerzita Palackého, Přírodovědecká fakulta, 17. listopadu 1192/12, 771 46 Olomouc
lucie.hochvaldova01@upol.cz

Aplikační možnosti koloidních částic a podobně i nanočástic, odvíjející se od velikosti, tvaru a další fyzikálních a chemických vlastností, lze ovlivnit výběrem metody přípravy. [1] Jedna z doposud známých metod přípravy, založená na redukcí stříbrných iontů na kovové stříbro, využívá kovu, který se v systému může vyskytovat ve více oxidačních stavech. Nejčastěji se pak využívají měďné, cínaté a železnaté ionty, jejichž redoxní potenciál je dostatečně negativní na to, aby způsobily redukcí iontového stříbra. [2]

Cílem této práce bylo studium vlivu redoxního potenciálu redukčního činidla na syntézu nanočástic stříbra. Redoxní pár, použitý pro syntézu nanočástic stříbra, je v tomto případě založený na různých oxidačních stavech cínu, tedy na páru $\text{Sn}^{2+}/\text{Sn}^{4+}$. Redox potenciál tohoto systému byl postupně měněn pomocí přídavku peroxidu vodíku k roztoku cínaté soli, čímž docházelo ke změně poměru cínaté a ciničité soli v reakčním systému. Pro reprodukovatelnou přípravu nanočástic stříbra v uvedeném systému bylo třeba vyladit řadu parametrů, zejména šlo o koncentrace reaktantů, pH, teplotu a přídavek stabilizátorů. Výsledný reakční systém umožnil přípravu velmi malých nanočástic stříbra (průměrná velikost cca 3 nm), u kterých byla následně studována katalytická aktivita.

Autoři děkují za finanční podporu vnitřního grantu UP Olomouc projekt IGA_PrF_2017_025.

[1] ŘEZANKA, P.; Záruba, K. et Král. V. (2007): Chemické listy 101, 881–885.

[2] GAJDA, Tamás, Pál Sipos a Heinz Gamsjager. The standard electrode potential of the $\text{Sn}^{4+}/\text{Sn}^{2+}$ couple revisited. Monatshefte für Chemie - Chemical Monthly. 2009, 140(11), 1293-1303

3P14**REZISTENCE BAKTERIÍ VŮČI
NANOČÁSTICÍM STŘÍBRA**

Aleš Panáček¹, Libor Kvítek¹, Monika Smékalová¹,
Renata Vecerová², Milan Kolář², Magdalena
Röderová², Marek Šebela³, Robert Pucek¹, Radek
Zbořil¹

¹Katedra fyzikální chemie, Regionální centrum
pokročilých technologií a materiálů, Přírodovědecká
fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17.
listopadu 12, 77146 Olomouc
ales.panacek@upol.cz

²Ústav mikrobiologie, Lékařská fakulta, Univerzita
Palackého v Olomouci, Hněvotínská 3, 775 15
Olomouc

³Katedra biochemie, Přírodovědecká fakulta,
Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12,
77146 Olomouc

Nanočástice stříbra vykazují významnou antimikrobiální aktivitu proti širokému spektru bakterií a hub v koncentracích, které nejsou cytotoxické pro lidské buňky [1-3]. V současné době se materiály na bázi stříbrných částic úspěšně používají v různých biomedicínských a antimikrobiálních technologiích a v produktech používaných v každodenním životě jako alternativa k běžným antimikrobiologickým přípravkům. Zatímco bakteriální rezistence vůči antibiotikům je v odborné literatuře intenzivně diskutována, v případě nanočástic stříbra nebyl plně prozkoumán možný vývoj bakteriální rezistence po opakované dlouhodobé expozici. V naší práci bylo prokázáno, že gramnegativní bakterie *E. coli* a *P. aeruginosa* si mohou vyvinout odolnost proti antibakteriálním účinkům stříbrných nanočástic po opakované a dlouhodobé expozici. Mechanismus odolnosti spočívá v agregaci nanočástic stříbra působením flagellinu (bílkoviny tvořící základní stavební jednotku bakteriálního bičíku) za vzniku rozměrných agregátů nevykazujících biologický účinek. Na základě genomické analýzy nebyla prokázána žádná genetická změna bakterií, jedná se tedy pouze o fenotypovou adaptaci vedoucí k eliminaci antibakteriálních účinků nanočástic stříbra.

Práce vznikla za finanční podpory projektu LO1305 Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky, projektu 15-22248S Grantové agentury České republiky a projektu AZV VES 15-27726A Ministerstva zdravotnictví České republiky.

[1] Ales Panacek, Libor Kvitek, Robert Pucek et al.: J. Phys. Chem. B 110, (2006)

[2] Ales Panacek, Milan Kolar, Renata Vecerova et al.: Biomaterials 30, (2009)

[3] Ales Panacek, Monika Smekalova, Renata Vecerova et al.: Colloids Surf., B 142, (2016)

3P15**ANTIBAKTERIÁLNÍ POVRCHOVÁ
ÚPRAVA ORTOPEDICKÝCH
IMPLANTÁTŮ NA BÁZI NANOČÁSTIC
STŘÍBRA**

Šárka Hradilová, Aleš Panáček, Robert Pucek, Libor
Kvítek a Jiří Gallo

Regionální centrum pokročilých technologií a
materiálů, Univerzita Palackého Olomouc, Šlechtitelů
27, 783 71 Olomouc, Česká republika.
Sarka.hradilova@upol.cz

Infekce protetických kloubů jsou obávanou komplikací artroplastiky spojené se zvýšenou morbiditou i mortalitou. Meziročně stoupá počet pacientů, kteří potřebují kloubní náhradu. Příčin je několik, patří sem zejména rostoucí životní úroveň a s ní související vyšší doba dožití, ale i nadváha. Očekává se, že zvýšené využití implantátů v medicíně bude mít za následek přirozený nárůst počtu infekcí tohoto typu. Následná antibiotická léčba řeší až důsledky a ne vždy je úspěšná. Implantát je tělu cizí předmět, i když inertní, ale stále se může stát živnou půdou pro tvorbu biofilmu. A právě tvorba biofilmu představuje kritický moment, kdy se rozhoduje o rozvoji infekce.

Historie ukázala, že prevence je nejlepší léčbou. Prevence infekcí spojených s implantáty by měla zahrnovat inhibici tvorby biofilmu, eliminaci bakterií a minimalizaci lokální suprese imunitní odpovědi. Současná znalost antimikrobiálních povrchových úprav vhodných pro prevenci infekce protetických kloubů je značná [1] a stále se hledají nové cesty. V posledních letech se do popředí zájmu dostávají povrchové úpravy na bázi nanočástic, především těch, které mají výrazné antibakteriální vlastnosti. Nespecifické antibakteriální účinky stříbra, ať už ve formě kovu, iontů nebo ve sloučeninách s jinými látkami, jsou známy po staletí.

Z naší spolupráce s ortopedy vzešlo několik slibných způsobů povrchové úpravy implantátů pomocí nanočástic. Naším cílem je vysoká antibakteriální aktivita povrchů a s ní související minimalizace adheze bakterií a inhibice tvorby biofilmu; nízká toxicita vůči hostitelskému organismu a také odolnost povrchu proti mechanickému opotřebení po dobu životnosti implantátu. První výsledky antibakteriálních i

cytotoxických testů ukazují, že naše snahy jsou úspěšné.

Tato práce vznikla za finanční podpory projektu LO1305 Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky, GAČR (projekt No.15-22248S) a grantu Ministerstva zdravotnictví České republiky (AZV VES 15-27726A).

- [1] Gallo J., Panacek A., Pucek R., Kriegova E., Hradilova A., Hobza M., Holinka M.: *Materials* 9(5), 337 (2016).

3P16

VODIVÉ POLYMÉRNE NANOVLÁKNA PRIPRAVENÉ ELEKTROSTATICKÝM ZVLÁKŇOVANÍM

Eliška Číková¹, Alena Šišková¹, Matej Mičušík¹, Zdenka Capáková², Michal Procházka¹, Mária Omastová¹

¹ Ústav polymérov, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, Slovensko

² Centrum polymerních materiálov, Fakulta technologická, Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Vavrečkova 275, 760 01 Zlín, Česká republika

Polypyrrol (PPy) patrí vďaka jednoduchosti svojej prípravy a chemickej stabilite k najštudovanejším vodivým polymérom. Medzi jeho ďalšie výhody patrí aj dobrá elektrická vodivosť a bio-kompatibilita, napr. pri elektrickej stimulácii buniek podporuje ich rast a ďalšie delenie [1]. Problematickým však zostávalo spracovanie PPy z hľadiska mechanických vlastností, pretože chemickou oxidatívnou polymerizáciou in-situ vzniká PPy vo forme čierneho prášku. Kombináciou PPy a elektrostaticky zvláknenej netkanej textílie sa však aj táto nevýhoda dá elegantne odstrániť. Pri našej štúdii sme ako nosič pre PPy zvolili zvlákněný polykaprolaktón (PCL) pre dobré mechanické vlastnosti, ale hlavne jeho dlhodobú stabilitu v organizme [2]. Prvým krokom nášho výskumu bolo pripraviť netkané textílie PCL s obsahom pyrolu (Py) s nano a submikrónovými rozmermi vlákien. Prítomnosť pyrolu vo vláknach bola potvrdená metódou ToF-SIMS. Takto pripravené PCL s obsahom Py bolo potom in situ povrchovo upravené vodivým polymérom PPy. Študovali sa polymerizačné podmienky a na charakterizáciu boli použité rôzne analytické metódy ako XPS a FTIR. Na charakterizáciu štruktúry a morfológie vlákien bolo použité SEM. Vybrané vzorky boli testované na biologickú aktivitu a toxicitu na myších fibroblastických bunkách. V testoch bola potvrdená predpokladaná schopnosť pripraveného

kompozitného materiálu - a to podpora rastu a delenia buniek.

Tato práce vznikla za podpory projektů VEGA 2/0149/14 a COST MP 1206.

- [1] C. E. Schmidt, V. R. Shastri, J. P. Vacanti, and R. Langer, "Stimulation of neurite outgrowth using an electrically conducting polymer.," *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.*, vol. 94, no. 17, pp. 8948–8953, 1997.
- [2] M. Yanilmaz and A. S. Sarac, "A review: effect of conductive polymers on the conductivities of electrospun mats," *Text. Res. J.*, vol. 84, pp. 1325–1342, 2014.

3P17

VYUŽITÍ DUTÝCH NANOČÁSTIC CaCO₃ PRO TECHNICKÉ APLIKACE

Jakub Vlček¹, Lubomír Lapčík¹, Matthew Ruszala²

¹ Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17 Listopadu 1192/12, 771 46 Olomouc, Česká republika jakub.vlcek@upol.cz

² University of Birmingham, Edgbaston, Birmingham, United of Kingdom B15 2TT

Minerální plniva se používají jako funkční aditiva, které výrazně ovlivňují mechanické a funkční vlastnosti finálních kompozitů. Přítomnost dutých nanočástic CaCO₃ v polymerních maticích (polyethylen, polypropylen, polyamid) zvyšuje Youngův modul pružnosti kompozitu. Díky pevnosti kuliček při kompresi dochází také ke zvýšení absorbované mechanické energie v důsledku lomu stěn nanokuliček. Tento jev se využívá při přípravě materiálu, které vyžadují velkou odolnost vůči dynamickému namáhání a současně mají nízkou hustotu, zejména v leteckém, automobilovém a lodním průmyslu např. jako komponenty interiérů a exteriérů dopravních prostředků.

Sférické duté nanočástice CaCO₃ se v posledních letech také používají jako bílý pigment do nátěrových krycích suspenzí. Ve srovnání s běžně používaným pigmentem TiO₂ zatěžují mnohem méně životní prostředí, výrazně snižují hmotnost krycí suspenze a snižují energetickou náročnost při jejich výrobě a vykazují vyšší bělost pro aplikace v průmyslu výroby barev a laků. Díky dutému charakteru dochází na těchto částicích k rozptylu světla, který způsobuje dobrou krycí schopnost a neprůhlednost nátěru již v tenkých vrstvách.

Tato práce byla podpořena vnitřním grantem UP Olomouc IGA_PrF_2017_028.

- [1] Lubomír Lapčík et. al.: Hollow spheres as nanocomposites fillers for aerospace and automotive composite materials application. *Composites Part B*, 106, 74-80, (2016)
- [2] Lubomír Lapčík et. al.: High density poly(ethylene)/CaCO₃ hollow spheres composites for technical application. *Composites Part B*, 113, 218-224, (2017)
- [3] Matthew Ruzsala et. al.: Low carbon footprint alternatives to rutile TiO₂ in paints: a review, (2003)

3P18

FLUORINATION OF NAPHTHALENEDIIMIDE- BENZOTHIADIAZOLE-BASED DUAL- ACCEPTOR COPOLYMERS FOR AMBIPOLAR FIELD-EFFECT TRANSISTORS

Hanna Makowska^{1,2}, Cunbin An¹, Tomasz Marszałek¹,
Wojciech Pisula^{1,2*}, Martin Baumgarten^{1*}

¹Max Planck Institute for Polymer Research,
Ackermannweg 10, 55128 Mainz, Germany

²Lodz University of Technology, Zeromskiego 116, 90-
924 Lodz, Poland

*pisula@mpip-mainz.mpg.de; baumgarten@mpip-
mainz.mpg.de

Ambipolar organic field-effect transistors have
gained increased attention due to their potential
application

in complementary logic circuits. The key design
of ambipolar device performance of donor (D) -
acceptor (A) copolymers is based on strong

acceptors introduced into the polymer backbone
combined with suitable donors units. To ensure a
balanced transport in ambipolar polymers, one
approach is to build polymers with two different
acceptor units. This dual acceptor architecture,
such as in the form of D-A1-D-A2, provides a
higher freedom in tuning the energy levels
(LUMO and HOMO) due to an enhanced degree
of structure combination. In this work, we
describe two dual-acceptor based polymers P1
and P2 which are composed of both
naphthalenediimide (NDI) and benzothiadiazole
(BTZ) or NDI and difluorinated BTZ (F-BTZ).

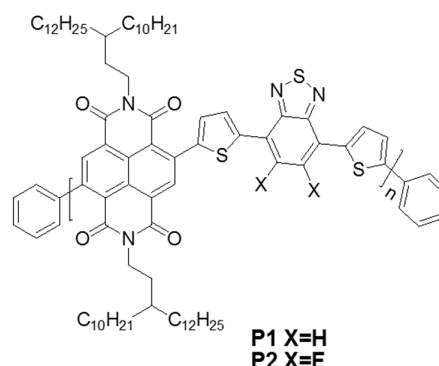


Figure 1. The molecular structure of dual-acceptor based polymers.

- [1] C.-W. Ge et al.: *J. Polym. Sci. A Polym. Chem.* (2014) 52, 2356-2366.
- [2] C. Gu et al.: *Chem. Mater.* (2013) 25, 2178-2183.

PREDNÁŠKY - SEKCIA 4: ANORGANICKÁ A MATERIÁLOVÁ CHÉMIA

4P01

ON THE ATTRACTIVITY OF BENTONITES AND CLAY MINERALS FOR THE CHEMISTS

Peter Komadel¹, Lukáš Petra¹

*Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of
Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava,
Slovakia, peter.komadel@savba.sk*

Chemically modified bentonites are materials of
widespread scientific and technological

importance for many years. This contribution is
based on data provided some years ago but with
significant effect on recent situation. Both acid
activation and chemical treatments cause
chemical modification of montmorillonite, the
main component in bentonites. This was clearly
shown by Carrado and others [1, 2] leading to
extensive research in this part of chemistry. This
contribution will summarize why various clay
substances are stimulating for the chemists and a
short part of historical aspects will be provided.
The polymer-clay nanocomposites (PCNs)
appeared in the literature shortly after the
researchers from Toyota car [3] published their
successful work on the synthesis of nylon 6-clay
hybrid. Since then the PCNs are very common in
various parts of cars all over the world. Other
extensive uses of CPNs is in packaging of food.
Theng concluded that PCNs now feature in

almost every area of modern industrial production, such as automobiles, construction, electronics, coatings and medicine. Packaging and the associated food industry, however, are the biggest users of these ‘hybrid’ materials, despite concerns about their environmental impact. PCNs may well pervade all aspects of daily living within the next 20 years.

The authors gratefully acknowledge financial support from the Slovak Research and Development Agency (project APVV-15-0741).

- [1] Carrado, K. A.; Bergaya, F. (Editors): Clay-based Polymer Nano-composites (CPN). CMS Workshop Lectures Vol. 15, (The Clay Minerals Society, Chantilly, VA., 278 p. (2007).
- [2] Carrado, K. A.; Komadel, P.: Acid activation of bentonites and polymer-clay nanocomposites. Elements. Volume: 5 Issue: 2 Pages: 111-116, (2009)
- [3] Usuki A, Kojima Y, Kawasumi M, Okada A, Fukushima Y, Kurauchi T, Kamigaito O Synthesis of nylon 6-clay hybrid. Journal of Materials Research 8: 1179-1184, (1993)
- [4] Theng, B.K.G. Formation and Properties of Clay-Polymer Complexes. Amsterdam: Elsevier, 503 p. (2012).

4P02

FYZIKÁLNÍ A CHEMICKÁ PODSTATA MIKRO A NANOSTRUKTUROVÁNÍ CHALKOGENIDOVÝCH SKEL

Miroslav Vlcek^{1*}, Karel Palka^{2,1}, Stanislav Slang¹,
Liudmila Loghina¹, Jan Buzek^{2,1}, Anastasia Iakovleva¹

¹Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Centrum materiálů a nanotechnologií, nám. Čs. legii 565, Pardubice, Česká republika

²Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Katedra obecné a anorganické chemie, Studentská 573, Pardubice, Česká republika

*miroslav.vlcek@upce.cz

Chalkogenidová skla (CHS) jsou typickým představitelem vysokoindexových skel vyznačující se navíc širokou oblastí optické propustnosti v infračervené části spektra. Tato skla nachází širokou škálu uplatnění v optice (difrakční prvky zejména pro IČ optiku), optoelektronice (optická vlákna, děliče paprsků,...), jako vysokokapacitní paměťová média (např. blue ray) nebo např. jako rezistory pro elektronovou litografii vyznačující se extrémní rozlišovací schopností (řádově jednotky nanometrů) [1].

Mnohé z aplikací CHS vyžadují, aby jejich leštěný povrch, resp. jejich tenké vrstvy byly mikro- resp. nanostrukturovány. Na rozdíl od

klasických oxidových skel je struktura CHS výrazně méně rigidní a lze ji poměrně snadno modifikovat expozicí vhodným zářením, svazkem iontů nebo elektronů [1, 2]. Složení CHS lze navíc lokálně měnit s využitím jevu fotoindukované difuze kovů (hlavně Ag) [3]. Všechny těchto jevů lze využít k tvorbě 3D mikro/nanostruktur následným selektivním mokřým/suchým leptáním. Je-li CHS exponováno intenzivním vysokoenergetickým svazkem fotonů může docházet k lokálnímu strukturování povrchu v důsledku lokálního termoplastického jevu nebo případné ablace. Přímého mikro-strukturování povrchu CHS lze dosáhnout i lisováním za tepla.

V této práci jsou diskutovány fyzikální a chemická podstata v současné době užívaných metod 3D strukturování CHS a uvedeny příklady tvorby difrakčních prvků v binárních a ternárních CHS na bázi germania a arzenu.

Autoři děkují za finanční podporu projektu č. 16-13876S financovanému Grantovou agenturou České republiky a takéž projektům LM2015082 a ED4.100/11.0251 financovaných Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy České republiky.

- [1] J-L Adam (Editor), X. Zhang (Editor), Chalcogenide Glasses: Preparation, Properties and Applications, Woodhead Publishing (2013)
- [2] Jain, H. Vlcek, M., J. Non-Cryst. Solids, **354**, 1401 – 1406 (2008)
- [3] M. Kalyva, A. Siokou, S. Yannopoulos, T. Wagner, J. Orava, M. Frumar, J. Non-Cryst. Solids, **355**, 1844 – 1848 (2009)

4P03

XPS AND NMR SPECTROSCOPY OF TERNARY FLUORIDES

Miroslav Boča¹

¹Institute of Inorganic Chemistry SAS, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, uachboca@savba.sk

Several aspects of application of XPS to the analysis of ternary fluorides will be discussed. More specifically:

- X-ray photoelectron spectroscopy as a detection tool for coordinated or uncoordinated fluorine atoms demonstrated on fluoride systems NaF, K₂TaF₇, K₃TaF₈, K₂ZrF₆, Na₇Zr₆F₃₁ and K₃ZrF₇
- XPS correlations in the series KTaF₆, K₂TaF₇, K₃TaF₈ vs KNbF₆, K₂NbF₇ and K₃NbF₈

Correlation of XPS and NMR spectroscopy of Li₂ZrF₆, Rb₂ZrF₆, Cs₂ZrF₆, Na₃ZrF₇, (NH₄)₃ZrF₇,

K_3ZrF_7 , Li_4ZrF_8 , K_2ZrF_6 , $\text{Na}_5\text{Zr}_2\text{F}_{13}$, $\text{Na}_7\text{Zr}_6\text{F}_{31}$, and $(\text{NH}_4)_2\text{ZrF}_6$.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-15-0479 and by the Scientific Grant Agency of the Ministry of Education of the Slovak Republic and the Slovak Academy of Sciences under no. 2/0114/16.

4P04

SOLAR THERMAL ELECTROLYTIC PRODUCTION OF MAGNESIUM FROM MOLTEN FLUORIDES: ELECTROCHEMICAL REACTION KINETICS, MASS TRANSPORT AND REFLECTIONS ON COMMERCIAL VIABILITY

R. Palumbo¹, M. Korenko^{1,2}, N. Leonard¹, L.J. Venstrom¹, S. Nudahi¹, R. Diver³, C. Larson¹, K. Blood¹, P.T. Kissinger³

¹Valparaiso University 1900 Chapel Drive Valparaiso, Indiana, 46383 USA

²Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dubravská cesta 9, Bratislava 84536 Slovakia

³Diver Solar LLC 1112 Monte Largo NE Albuquerque, New Mexico 87123, USA

⁴Purdue University, 610 Purdue Mall, West Lafayette, Indiana 47907, USA

We were exploring the commercial viability for producing Mg from MgO (dissolved in a eutectic mixture of MgF_2 – CaF_2), via electrolysis at 1250 K for which thermal energy is supplied to the cell as a substitute for some electric energy. The thermal input source may be concentrated sunlight or natural gas. Current efficiency values were near 90%. We were also examining the kinetic and transport processes involved in Mg production, using a steel (or Mo) cathode, and carbon anode. Exchange current densities, transfer coefficients, and diffusion coefficients of the electroactive species were established using a combination of cyclic and linear sweep voltammetry, chronoamperometry and electrochemical impedance spectroscopy. The cathode kinetics are described by a concentration dependent Butler–Volmer equation. The exchange current density and cathodic transfer coefficient are $11 \pm 4 \text{ A cm}^{-2}$ and 0.5 ± 0.12 respectively. The kinetics of the anode are described by two Tafel equations: at an overvoltage below 0.4 V, the exchange current density is $0.81 \pm 0.2 \text{ mA cm}^{-2}$ with an anodic transfer coefficient of 0.5 ± 0.1 ; above 0.4 V overvoltage the values are $0.14 \pm 0.05 \text{ mA cm}^{-2}$

and 0.7 ± 0.2 respectively. The diffusion coefficients of the electroactive species are $D(\text{Mg}^{2+}) = 5.2 \pm 0.6 \text{ E-5 cm}^2 \text{ s}^{-1}$ and $D(\text{Mg}_2\text{O}_4^{2-}) = 7.2 \pm 0.2 \text{ E-6 cm}^2 \text{ s}^{-1}$. The ionic conductivity of the electrolyte is ca 2.6 S cm^{-1} . We will present a techno-economic analysis of an 18,000 metric tons per year electrolytic process for producing Mg from MgO with and without out a concentrated solar thermal input. The solar thermal input is delivered via power tower technology and the evaporation and condensation of sodium. Energy requirements for the process at scale were based on thermodynamics and an extrapolation of laboratory measurements of the electrochemical kinetic and mass transport parameters via a finite element numerical model. While technically possible, integrating a solar thermal input does not make economic sense without crediting avoided CO_2 emissions. A solar thermal input reduces energy operational costs from \$ 0.654/kg to as low as \$ 0.481/kg, but it also lowers the Mg production rate of the electrolytic cells such that more cells are required to achieve production capacity, which, in turn, increases capital and maintenance costs. The net operational savings are negligible. The estimated operational costs to produce Mg are ~\$2.46/kg. At this cost, the process without a solar thermal input is economically tantalizing *vis à vis* the current commercial processes for producing Mg, and its CO_2 emission level is 46% lower than that of the Pidgeon process, currently the predominant method for producing Mg.

4P05

COMPARISON OF PHYSICO-CHEMICAL PROPERTIES OF MOLTEN SYSTEMS BASED ON LANTHANUM FLUORIDE

Blanka Kubíková¹, Jarmila Mlynáriková¹, Eva Mikšíková¹, Z. Netriová¹, M. Šimurda¹, M. Boča¹

¹Ústav anorganickej chémie SAV, Dúbravská cesta 9, 84536 Bratislava
uachkubi@savba.sk

Systems with rare-earth elements and their compounds are widely investigated in last decades. Besides their applications using magnetic and optical properties, the research of molten lanthanides mixtures is connected with their interest in areas as metallurgy or nuclear energy applications and reprocessing of spent nuclear fuel.

Our recent work is focused on two molten systems containing lanthanum fluoride - (LiF -

$\text{NaF}_{\text{eut}}\text{-LaF}_3$ and $(\text{LiF-CaF}_2)_{\text{eut}}\text{-LaF}_3$ and comparison of their physico-chemical properties. Phase equilibrium, density and volume properties, surface tension and electrical conductivity have been investigated in restricted area.

The results have shown similarities in behavior of certain properties, but some differences in course of temperature dependencies of other properties have been observed.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-15-0479 and by the Scientific Grant Agency of the Ministry of Education of the Slovak Republic and the Slovak Academy of Sciences under no. 2/0114/16.

4P06

MAKROCYKLICKÉ LIGANDY AKO CHELÁTORY ŤAŽKÝCH KOVŮ

Miroslava Litecká¹, Zuzana Vargová¹, Róbert Gyepes², Miroslav Almáši¹, Mária Vilková³

¹Katedra anorganickej chémie, ÚCHV PF UPJŠ, Moyzesova 11, Košice 04154,

zuzana.vargova@upjs.sk

²Katedra anorganické chémie, Přírodovědecká fakulta UK, Albertov 6, Praha 12843

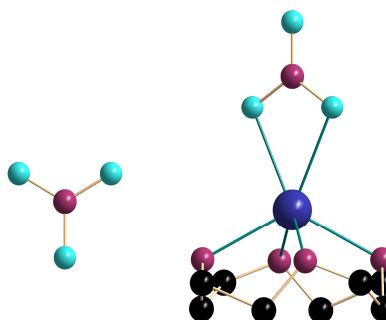
³Laboratórium NMR, ÚCHV PF UPJŠ, Moyzesova 11, Košice 04154

Otravy ťažkými kovmi, či už úmyselné alebo náhodné majú bohatú históriu. V súčasnej dobe sa táto problematika objavuje najmä v súvislosti s priemyselnou výrobou a ekologickými rizikami odstraňovania a skladovania toxických odpadov [1]. Ťažké kovy sa nielen touto cestou môžu dostať priamo do kontaktu s človekom, čo môže zapríčiniť v závislosti od dávky a spôsobu intoxikácie radu zdravotných komplikácií [2].

Vedecké výskumy v tejto oblasti sú študované do značnej hĺbky a je popísaných viacero mechanizmov účinku, spôsobov determinácie a v neposlednom rade možností odstraňovania toxických kovov. Či už v prípade akútnej, alebo chronickej otravy sa na liečbu týchto typov otráv používa chelatačná terapia [2]. Chelatačné činidlá používané v súčasnej medicíne sú látky využívajúce nepriaznivú tendenciu katiónov toxických kovov viazať sa na funkčné skupiny molekúl, ktoré sa nachádzajú v mnohých biomolekulách nevyhnutných pre správne fungovanie najdôležitejších procesov v živom organizme. Vhodné chelátory sú schopné tieto katióny viazať do komplexov, ktoré následne spĺňajú podmienky na čo najbezpečnejšiu elimináciu z organizmu. V medicínskej ale aj

environmentálnej praxi sa používajú činidlá prevažne na báze aminopolykarboxylátov alebo organofosfonátov [2]. Chelatačné a makrocyklické vlastnosti polyamínových cyklických ligandov (hlavne cyklénu a cyklámu) sa taktiež využívajú v rôznych oblastiach (MRI, medicínska diagnostika a pod.).

V príspevku budú prezentované komplexotvorné vlastnosti cyklénu (1,4,7,10-tetra-aza-cyklo-dodekán) voči toxickým iónom kovov (Cd^{2+} , Hg^{2+} , Pb^{2+} , Ag^{+}), ktoré boli študované v tuhej fáze (monokryštálová RTG analýzy, IČ spektroskopia, termická analýza) a v roztoku (potenciometria a ^1H NMR spektroskopia v prípade Cd^{2+} a Pb^{2+}), pričom výsledky boli porovnané so Zn^{2+} iónom [3].



Obr. 1. Jedna zo študovaných zlúčenín.

Táto práca vznikla vďaka finančnej podpore grantu MŠ SR Kega 002UPJŠ-4/2015.

- [1] S.J.S. Flora, V. Pachauri. Int. J. Environ. Res. Public Health, 7, 2745 (2010).
- [2] I.S.S. Pinto, I.F.F. Neto, H.M.V.M. Soares. Environ. Sci. Pollut. Res., 21, 11893 (2014).
- [3] M. Litecká, R. Gyepes, Z. Vargová, M. Vilková, M. Almáši, M. Walko, J. Imrich, J. Coord. Chem. 70, 1698 (2017).

4P07**STRUCTURES, EPR SPECTRA AND MAGNETISM OF TRANSITION METAL DIPICOLINATES WITH N-DONOR LIGANDS**

Petra Masárová¹, Vladimír Kuchtanin¹, Milan Mazúr², Ján Moncol¹

¹Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinsky 9, 812 37 Bratislava, Slovak Republic

masarova.petra@gmail.com

²Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, SUT, Radlinsky 9, 812 37 Bratislava, Slovak Republic

Seven new transition metal (Co, Ni, Cu or Zn) dipicolinate compounds with N-donor ligands (neocuproine, benzimidazole and its derivatives) have been synthesized, structurally characterized by single-crystal X-ray diffraction analysis and studied by EPR, UV/VIS and IR spectroscopies. The compounds can be divided into two groups, depending on the coordination mode of dipicolinate anion: the first, in which dipicolinate anion is only chelating and the second with dipicolinate anion chelating as well as bridging. The first group compounds are monomers, whereas compounds belonging to the second group are either dinuclear or polymeric. Dinuclear Co(II) and Ni(II) dipicolinate complexes with neocuproine ligand are similar, mononuclear Cu(II) and Zn(II) compounds with neocuproine are structurally different.

One of three prepared copper(II) benzimidazole compounds is a monomer, the other copper(II) dipicolinate compounds with substituted benzimidazoles are polymers. EPR spectra for Cu(II) monomers (spin state of $S = 1/2$) are mostly of axial symmetry. Investigation of magnetic properties in the case of Co(II) and Ni(II) dinuclear complex revealed the presence of interesting interactions and will be object of our further research.

I would like to thank Dr. Lubor Dlhán for magnetic measurements. Authors also gratefully acknowledge the financial support given by the Slovak Research and Development Agency APVV-14-0078 and APVV-14-0073 and financial contribution from the Slovak Chemical Society.

4P08**STRUCTURALLY DIVERSE MANGANESE(III)-SALEN COMPLEXES WITH BRIDGING FORMATE LIGAND**

Jan Moncol¹, Martin Schoeller¹, Mario Izakovič¹

¹Department of Inorganic Chemistry, Institute of Inorganic Chemistry, Technology and Materials, Slovak University of Technology, SK-81237 Bratislava, Slovakia

A series of five Mn(III)-salen complexes with formate-bridging ligand of formula $[\text{Mn}(\text{salen})(\text{HCO}_2)]_n$ (1), $[\text{Mn}(5\text{-Brsalen})(\text{HCO}_2)]_n$ (2), $[\text{Mn}(5\text{-Clsalen})(\text{HCO}_2)]_n$ (3), $[\text{Mn}(3,5\text{-Br}_2\text{salen})(\text{HCO}_2)]_n$ (4) and $\{[\text{Mn}(3,5\text{-Cl}_2\text{salen})(\text{HCO}_2)] \cdot \text{MeOH}\}_n$ (5) have been synthesized and structural characterized using single-crystal X-ray crystallography.

The manganese(II) salen complexes have been prepared from Schiff bases and $\text{Mn}(\text{HCO}_2)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$. The Schiff based have been obtained by the condensation of salicylaldehyde, 5-bromosalicylaldehyde, 5-chlorosalicylaldehyde, 3,5-dibromosalicylaldehyde or 3,5-dichlorosalicylaldehyde and 1,2-diamineethane.

The crystal structures of $[\text{Mn}(\text{salen})(\text{HCO}_2)]_n$ (1) in variety temperatures show two phase transitions.

We thank Slovak Research and Development Agency (APVV-14-0078), Slovak Grant Agency (VEGA 1/0388/14)

PREDNÁŠKY - SEKCIA 5 ORGANICKÁ CHÉMIA

5P01

POTENTIAL CHROMOGENIC SUBSTRATE FOR GH30 GLUCURONOXylanases – A TOTAL SYNTHESIS

Marek Baráth¹, Ján Hirsch¹, Vladimír Puchart¹,
Peter Biely¹

¹Institute of Chemistry, Center for Glycomics, 845 38
Bratislava
marek.barath@savba.sk

Endo- β -1,4-xylanases (EC 3.2.1.8) are the enzymes that catalyze the hydrolysis of the main chain of plant xylans. By the decomposition of xylan component of hemicellulose, the xylanases are involved in microbial degradation of lignocellulosic biomass, thus playing an important role in carbon cycle. The xylanases are of a great interest for several decades due to their numerous applications in bioenergy and various branches of industry, e.g. food and feed, pulp and paper, cosmetics etc.

An important class of endoxylanases is grouped to GH30 family. GH30 xylanases exhibit a specificity for MeGlcA substitution in plant glucuronoxylans [1].

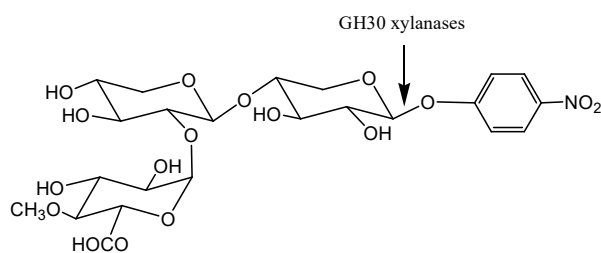


Fig. 1.

Here we describe a total chemical synthesis of a new nitrophenyl glycoside derived from a trisaccharide (Fig. 1). The aldotriouronic acid carrying an artificial chromophore is designed on the basis of the unique accommodation of the MeGlcA side chain by GH30 xylanases, resulting in the products that are MeGlcA-branched exclusively at xylosyl residue penultimate from reducing end. In addition to being a specific substrate for the GH30 glucuronoxylanases, their activity should be easily detected and spectrophotometrically quantified using the chromogenic aldotriouronic acid.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-0602-12, and by Scientific Grant Agency (2/0037/14).

[1] Vršanská, M. et al., FEBS Journal, (2007), 274, 1666-1677

5P02

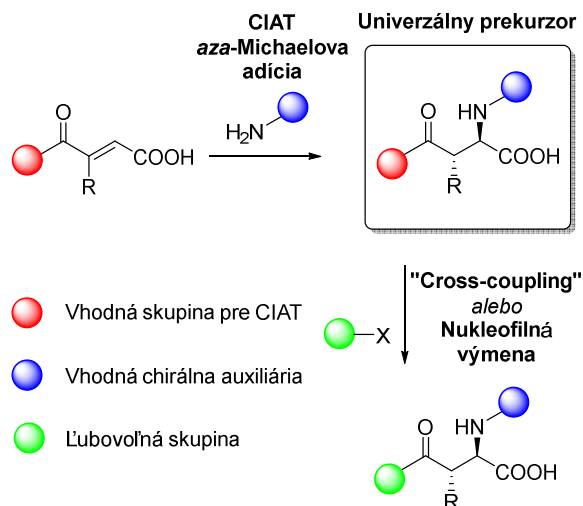
KRYŠTALIZÁCIOU-INDUKOVANÁ ASYMETRICKÁ TRANSFORMÁCIA - MODERNÝ NÁSTROJ ORGANICKEJ SYNTÉZY

Pavol Jakubec¹, Eva Puchľová¹, Dušan Berkeš¹

¹Oddelenie organickej chémie, Fakulta chemickej
a potravinárskej technológie, Slovenská technická
univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37,
Bratislava
pavol.jakubec@stuba.sk

Jedným z primárnych cieľov a výziev modernej chémie je vývoj stereoselektívnych transformácií umožňujúcich tvorbu funkcionalizovaných opticky aktívnych molekúl s vysokým stupňom štruktúrnej diverzity a to všetko z jednoduchých a dostupných východiskových molekúl. Náročná požiadavka na efektívnu syntézu chirálnych zlúčenín vo vysokej enantiomérskej čistote je jednou z hnacích síl neustáleho rozvoja nových metód modernej organickej syntézy. Okrem asymetrickej syntézy sú úspešnou alternatívou prípravy enantiomérsne čistých zlúčenín aj procesy ekvibrácie stereoizomérsnej zmesi vedúce k jednému stereoizoméru, ktoré sú označované ako asymetrické transformácie. Jednou z viacerých možných variant asymetrickej transformácie je kryštalizáciou-indukovaná asymetrická transformácia (CIAT).[1,2] Aj keď je využitie CIAT-u už bezpochyby mimoriadne atraktívnou a výborne rozvinutou metodikou organickej syntézy otestovanou v totálnej syntéze prírodných látok, existuje niekoľko skutočností, ktoré zatiaľ bránia naplno rozvinúť jej ohromný potenciál. Okrem obmedzenosti len na kryštalické látky a ťažkej predvídateľnosti CIAT-u na nových substrátoch možno za najväčší nedostatok považovať najmä nevyhnutnosť syntézy špecifických východiskových zlúčenín. Predkladaná práca popisuje principiálne odstránenie nevýhod CIAT-u v *aza*-Michaelovej adícii *N*-nukleofilov na 3-acylakrylové kyseliny[3] vytvorením univerzálneho prekursoru pomocou CIAT. Myšlienka je demonštrovaná na syntéze enantiomérsne čistého univerzálneho prekursoru pre 4-substituované deriváty 2-amino-4-oxobutánových kyselín a následnej

transformácii tohto intermediátu na široké spektrum enantioméne čistých α -aminokyselín a ich derivátov (Obr. 1).



Obr. 1. CIAT-om sprostredkovaná syntéza univerzálného prekursoru pre ľubovoľné enantioméne čisté 4-substituované deriváty 2-amino-4-oxobutánových kyselín.

Práca vznikla za podpory Agentúry na podporu výskumu a vývoja (zmluva č. APVV-16-0258) a grantu v rámci Programu na podporu mladých výskumných pracovníkov na STU v Bratislave.

- [1] Anderson, N. G. *Org. Proc. Res. Devel.* **2005**, 9, 800-813.
- [2] Brands, K. M.; Davies, A. J. *Chem. Rev.* **2006**, 106, 2711-2733.
- [3] Jakubec, P.; Berkeš, D. *Tetrahedron: Asymmetry* **2010**, 21, 2807-2815.

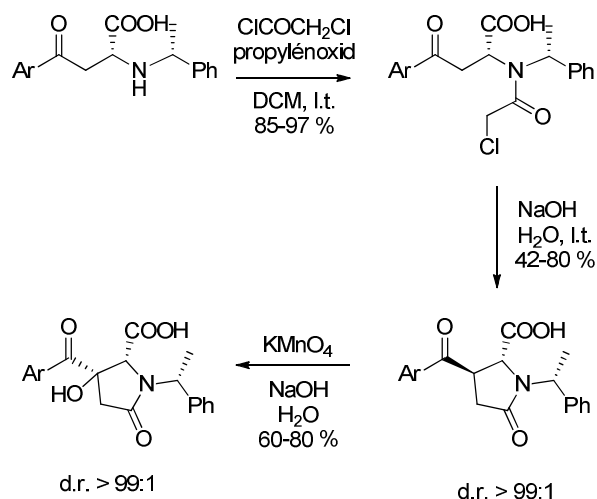
5P03 EFEKTÍVNA SYNTÉZA FUNKCIONALIZOVANÝCH PYROLIDÍNŮV

Eva Puchľová¹, Jozef Markus¹, Dušan Berkeš¹

¹Oddelenie organickej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 15 Bratislava
eva.puchlova@stuba.sk

So súčasným rýchlym rozvojom farmaceutického priemyslu narastá aj dopyt po nových a štruktúrne rozmanitých zlúčeninách. Čoraz vyššie nároky kladené na enantioménu čistotu týchto zlúčenín sú podnetom pre vývoj efektívnych a praktických syntetických metód. Stereoselektívna syntéza a štúdium štruktúrnych modifikácií, ktorými je možné dosiahnuť vysoký stupeň stereoselektivity sa tak stávajú obrovskou výzvou v oblasti modernej organickej chémie.

Predkladaná práca popisuje praktickú, vysokostereoselektívnu metódu prípravy funkcionalizovaných pyrolidínových štruktúr frekvencovane sa vyskytujúcich v dôležitých enantioméne čistých prírodných látkach [1]. Efektívna syntéza začína priamočiarou prípravou enantioméne a diastereoméne čistých α -aminokyselín využitím kryštalizáciou-indukovanej asymetrickej transformácie [2]. Následne boli tieto synteticky cenné intermediáty *N*-acylované využitím chlóracetyl chloridu v prítomnosti propylénoxidu v dichlórmetáne za laboratórnej teploty [3]. Získané *N*-acylované aminokyseliny podstúpili bezprecedentnú 5-*exo*-tet cykлизáciu za vzniku vysoko funkcionalizovaných pyrolidínov. Táto kľúčová transformácia uvedenej sekvencie spĺňa aj najnáročnejšie kritériá modernej organickej reakcie nakoľko prebieha s vysokou stereoselektivitou v miernych reakčných podmienkach vo vodnom prostredí. Ďalšou atraktívnou črtou prezentovanej syntézy je rôznorodosť substituentov v γ -pozícii. Dôležitosť a ľahká modifikovateľnosť pripravených pyrolidínov bola demonštrovaná stereoselektívnou hydroxyláciou α -polohy podľa prítomného ketónu. Dosiahnutá oxidácia je napriek ľahkej dostupnosti a mnohým výhodám použitia manganistanu draselného unikátnou metódou diastereoselektívnej α -hydroxylácie ketónov.



Obr. 1. Efektívna syntéza funkcionalizovaných pyrolidínov.

Práca vznikla za podpory ZonMw Memorabel program (projectnr: 733050105).

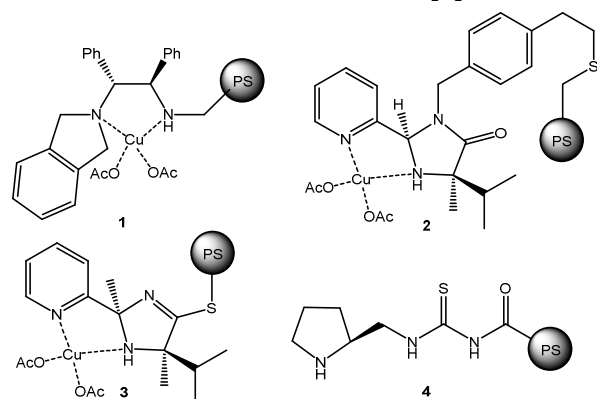
- [1] Bhat, C.; Tilve, S. G. *RSC Adv.* **2014**, *4*, 5405
 [2] Jakubec, P.; Berkeš, D., *Tetrahedron: Asymmetry* **2010**, *21*, 2807-2815
 [3] Geron-Navarro, G.; Bonache, M. A.; Herranz, R.; García-López, M. T.; González-Muñiz, R. *J. Org. Chem.* **2001**, *66*, 3538

5P04 ENANTIOSELEKTIVNÍ KATALYZÁTORY ZAKOTVENÉ NA PERLOVÝCH KOPOLYMERECH STYRENU

Miloš Sedlák

Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
 Milos.Sedlak@upce.cz

Zachování současného životního standardu lidské společnosti není dále možné bez rozvoje ekologicky udržitelných chemických postupů a technologií. Jednou z cest jak promyšleně nakládat se surovinami a energetickými zdroji je používání recyklovatelných katalyzátorů [1]. Mezi významné strategie, jak získat recyklovatelné katalyzátory, patří imobilizace známých homogenních katalyzátorů na pevné nosiče [1]. Organické polymery, zejména komerčně dostupné síťované perlové kopolymery styrenu např. MerrifieldTM a JandaJelTM patří mezi nejvýznamnější nosiče [2]. Značná výhoda zakotvených katalyzátorů spočívá v jejich snadné separaci a možné recyklaci, v jejich nízké ceně, ale také v možnostech použití v průtočných reaktorech. Tato přednáška je zaměřena na oblast vysoce efektivních recyklovatelných katalyzátorů založených na měďnatých komplexech a na organokatalyzátorech zakotvených na polystyrenových nosičích, které byly použity pro enantioselektivní Henryho reakci [2,3] a pro enantioselektivní Michaelovu adici [4].



Heterogenní katalyzátory **1-3** byly testovány pro reakci substituovaných benzaldehydů s nitromethanem, přičemž odpovídající 2-nitroethanoly byly připraveny ve vysokých výtěžcích a s vysokou enantioselektivitou (**1**: 97-99 %, 76-96 % ee; **2**: 49-95 %, 51-92 % ee; **3**: 81-97 %, 83-94 % ee) [2,3]. Katalyzátor **4** byl testován pro reakci cyklohexanonu se substituovanými 2-fenyl-1-nitroetheny (**4**: 92-99 %, 91-99 % ee) [4]. Po vícenásobné recyklaci katalyzátorů **1-4** nebylo pozorováno významné snížení výtěžků, také poklesy enantioselektivity byly minimální. Výše diskutované katalyzátory splňují řadu požadavků zelené a udržitelné chemie a představují tak ekologicky vstřícné systémy s vysokým aplikačním potenciálem pro provedení Henryho a Michaelovy reakce.

Autoři děkují za finanční podporu projektu GAČR No 17-08499S.

- [1] Drabina, P.; Harmand, L.; Sedlák, M. *Curr. Org. Synth.* **2014**, *11*, 879–888.
 [2] Nováková, G.; Drabina, P.; Frumarová B.; Sedlák, M. *Adv. Synth. Catal.* **2016**, *358*, 2541–2552.
 [3] Androvič, L.; Drabina, P.; Svobodová, M.; Sedlák, M. *Tetrahedron: Asymmetry* **2016**, *27*, 782–787.

5P05 MĚDNATÉ KOMPLEXY 2-(PYRIDIN-2- YL)IMIDAZOLIDIN-4-THIONŮ JAKO ENANTIOSELEKTIVNÍ KATALYZÁTORY PRO HENRYHO REAKCI

Gabriela Nováková¹, Pavel Drabina¹, Miloš Sedlák¹

¹Ústav organické chemie a technologie, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
 Gabriela.Novakova@student.upce.cz

Produkty asymetrické Henryho reakce jsou neracemické β -nitroalkoholy, které představují důležité intermedie sloužící k syntéze řady farmaceutických produktů. Z tohoto důvodu patří Henryho reakce mezi jednu z nejvíce studovaných asymetrických reakcí využívaných k hodnocení známých nebo nově připravených enantioselektivních katalyzátorů. Asymetrická Henryho reakce vyžaduje použití vhodných chirálních, opticky čistých ligandů často v kombinaci s ionty kovů, přičemž nejlepších výsledků bývá dosaženo v případě použití měďnatých komplexů [1].

V předchozí práci byla studována příprava a vlastnosti recyklovatelných enantioselektivních katalyzátorů pro Henryho reakci na bázi měďnatých komplexů substituovaných 2-

(pyridin-2-yl)imidazolidin-4-thionů, kdy bylo dosaženo vysoké katalytické aktivity, výborné enantioselektivity a mnohonásobné recyklace katalyzátoru [2]. V návaznosti na tyto výsledky byly studovány další imidazolidin-4-thionové katalyzátory. Cílem této práce bylo připravit novou sérii substituovaných 2-(pyridin-2-yl)imidazolidin-4-thionů a studovat katalytické aktivity jejich měďnatých komplexů na Henryho reakci. Bylo zjištěno, že nejúčinnější katalyzátor poskytuje odpovídající β -nitroalkoholy s enantioselektivitou až 98 % ee. Dále byla provedena imobilizace měďnatých komplexů těchto imidazolidin-4-thionů na polymerní nosič (botnavý chlormethylovaný polystyren) s ohledem na jejich možné využití jako recyklovatelné katalyzátory. Připravený heterogenní katalyzátor byl studován na Henryho reakci z hlediska katalytické aktivity, enantioselektivity a snadnosti recyklace [3].

Tato práce byla finančně podporována Grantovou agenturou ČR, projekt č. 17-08499S.

- [1] R. I. Kureshy, B. Dangi, A. Das, N. H. Khan, S. H. R. Abdi, H. C. Bajaj: *Appl. Catal. A Gen.*, (2012), 439, 74.
- [2] G. Nováková, P. Drabina, B. Frumarová, M. Sedlák: *Adv. Synth. Catal.*, (2016), 358, 2541.
- [3] G. Nováková, P. Drabina, J. Svoboda, M. Sedlák, *Tetrahedron: Asymmetry*, (2017), 28, 791.

5P06 PYRAZINACENES AND OXOPORPHYRINOGENS

Jonathan P. Hill¹, David Miklák¹, Matsushita¹, Jan Labuta¹, Katsuhiko Ariga¹

¹National Institute for Materials Science, Namiki 1-1, Tsukuba, Ibaraki, Japan
Jonathan.Hill@nims.go.jp

Porphyrins substituted with antioxidant 2,6-di-tert-butylphenol substituents have been shown to exhibit different conformations based on the oxidation state of those substituents leading to the oxoporphyrinogens.¹ On the other hand, pyrazinacenes are obtained by synthesis of linearly-fused 1,4-pyrazine groups giving molecules with potential as semiconductors, proton conductors or fluorescent labels. We have investigated both classes of compounds for their potential applications.² Here, we will describe the results of these investigations including highlighting the different compounds obtained from the porphyrin system, synthesis and structure in the phthalocyanine, TPA and HPB systems, and an extensive crystallographic

analysis of the resorcinarene system. We will also present synthetic aspects of the pyrazinacene system including new synthesis pathways for higher derivatives. Finally, a molecular switch based on mechanical extension of an oxoporphyrinogen molecule will be described.³

- [1] F. D'Souza, N. K. Subbaiyan, Y. Xie, J. P. Hill, K. Ariga, K. Ohkubo, S. Fukuzumi: *J. Am. Chem. Soc.* (2009) 131, 16138–16146.
- [2] S. Ishihara, J. Labuta, T. Šikorský, J. V. Burda, N. Okamoto, H. Abe, K. Ariga, J. P. Hill, *Chem. Commun.* (2012) 48, 3933–3935.
- [3] M. Perrin, J. P. Hill, D. Dulic, H. van der Zant, (2016) submitted.

5P07 2,5-DIARYL-4-HYDROXY-1,3-THIAZOLY S FLUORESCENČNÍMI VLASTNOSTMI

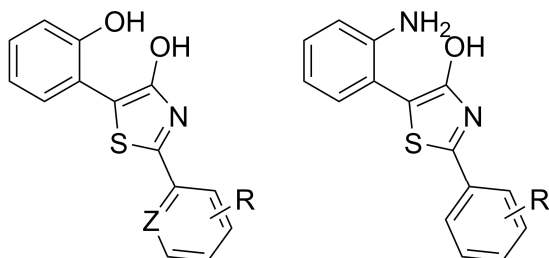
Jiří Hanusek¹, Richard Kammel¹, Denisa Tarabová,
Miloš Nepřas¹

¹Ústav organické chemie a technologie, FChT,
Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10
Pardubice, ČR
Jiri.Hanusek@upce.cz

1,3-Thiazolový skelet lze nalézt v řadě prakticky využitelných sloučenin jako jsou barviva (disperzní modře CI 102 a 106) vitaminy (vitamin B₁) nebo léčiva s antidiabetickými (glitazony), antifungálními (thiabendazol) a antibakteriálními (sulfathiazol) účinky. 1,3-Thiazolový skelet je i významným fluoroforem například v Luciferinu - bioluminiscenční látce světlušek. Teprve nedávno však byly zjištěny významné fluorescenční vlastnosti u 4-hydroxythiazolů [1], jejichž hydroxyskupina je snadno ionizovatelná a významně se tak podílí na spektrálních emisních charakteristikách (λ_{em} , ϵ_{em} , Stokesův posun).

Na našem pracovišti se dlouhodobě zabýváme transformačními reakcemi α -bromlaktónů a α -bromlaktamů, vedoucími nejčastěji právě k derivátům 1,3-thiazolu. Reakcí 3-brom-1-benzofuran-2(3H)-onu resp. 3-brom-1,3-dihydro-2H-indol-2-onu s aromatickými thioamidy byly připraveny [2, 3] dvě série 2-aryl-5-(2-hydroxyfenyl)-4-hydroxy-1,3-thiazolů resp. 2-aryl-5-(2-aminofenyl)-4-hydroxy-1,3-thiazolů (Obr. 1) vykazujících intenzivní fluorescenci v aprotických rozpouštědlech (dioxan, DMSO, CH₂Cl₂, acetonitril) a to jak v ionizované, tak i neionizované podobě. Kvantové výtěžky první série vykazující zářivě modrou/oranžovou fluorescenci se podle substituce a rozpouštědla pohybovaly v rozmezí $\Phi = 0.12-0.93$

(neionizovaná forma)/ $\Phi = 0.26-0.68$ (ionizovaná forma), kdežto u druhej série bola pozorovaná žltozelená/červeno-oranžová fluorescence s $\Phi = 0.11-0.41$ (neionizovaná forma)/ $\Phi = 0.13-0.36$ (ionizovaná forma). Jako kľúčový parametr, ovplyvňujúci fluorescenčné charakteristiky bola kromě substitučních efektů identifikována i intramolekulární vodíková vazba.



pro **Z** = CH: **R** = 4-CH₃O; 4-CH₃; H; 4-Cl; 3-Cl;
f: 4-CF₃ a pro **Z** = N: **R** = H.

Obr. 1. Struktura pripravených derivátů 1,3-thiazolu.

Autoři děkují MŠMT ČR za institucionální podporu a také studentskému projektu SGS-2017-003.

- [1] Stippich K., Weiss D., Guether A., Görls H., Beckert R.: *J. Sulphur Chem.* 30, 109-118 (2009).
- [2] Kammel R., Tarabová D., Machalický O., Nepraš M., Frumarová B., Hanusek J.: *Dyes Pigments* 128, 101-110 (2016).
- [3] Kammel R., Tarabová D., Brož B., Hladíková V., Hanusek J.: *Tetrahedron* 73, 1861-1866 (2017).

5P08

MAGNETICKÉ NANOČÁSTICE STABILIZOVANÉ V KAPALNĚ-KRYSTALICKÝCH MATRICÍCH

Anna Poryvaí¹, Michal Kohout¹, Vladimíra Novotná², Jiří Svoboda¹

¹VSCHT v Praze, Technická 5, 166 28 Praha, ²FZU AVČR, Na Slovance 2, 182 21 Praha
poryvaia@vscht.cz

Jednou z možností stabilizace kapalně-krytalických matic (LCM), je použití nanočástic (NČ), jejichž přídavek vede ke snížení viskozity výsledného materiálu a zlepšení kontaktu molekul LC s povrchem pixelu [1]. Přídavek magnetických NČ dále umožňuje ovládání LCM magnetickým polem. NČ, které nebyly nijak modifikovány, tvoří s LCM nestabilní koloidní systémy a rychle agregují [2]. Pro přípravu stabilních systémů se proto používají NČ modifikované nejrůznějšími surfaktanty.

V rámci prezentované studie byly připraveny série multifunkčních promesogenních ligandů.

Jejich vlastnosti jsou dány přítomností fotosenzitivní skupiny (N=N) a chirálních center (deriváty kyseliny mléčné). Zakotvení ligandů na povrch NČ je umožněno přítomností terminální fosfonové skupiny. Struktura ligandů byla prokázána pomocí ¹H, ¹³C, ³¹P NMR, IČ spektroskopie a hmotnostní spektrometrií. Stabilita UV-índukovaných (Z)-isomerů byla studována ¹H NMR spektroskopii. Modifikace NČ CoFeO₄ byla provedena zahříváním suspenze s přídavkem ligandů a kosurfaktantu (hexylfosfonové kyseliny). Modifikované NČ byly poté charakterizovány IČ spektroskopii a elementární analýzou. Cílové směsi byly připraveny přidáním roztoků LC k suspendovaným modifikovaným NČ. Po sonifikaci a dalším zpracování byly směsi analyzovány pomocí diferenční skenovací kalorimetrie a polarizační optické mikroskopie. V příspěvku bude diskutován vliv struktury ligandů na schopnost k stabilizaci NČ a vliv přídavku NČ na fyzikální vlastnosti LCM.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 15-02843S a účelové podpory na specifický výzkum (MŠMT č. 20-SVV/2017).

- [1] Chandran A., Prakash J., Naik K. K., Srivastava, A. K., Dabrowski R., Czerwinski M., Biradar A. M.: *J. Mater. Chem. C* 2, (2014)
- [2] Xu J., Bedrov D., Smith G., Glaser M.: *Phys. Rev. E*, (2009)

5P09

FOTOCHEMICKÁ KONTROLA UVOĽŇOVANIA, RESP. VIAZANIA KATIÓNOV KOVOV Z KOMPLEXOV DIARYLHYDRAZÓNOV

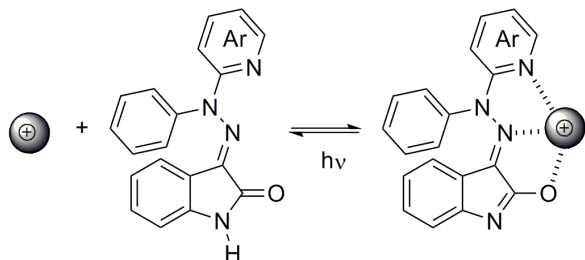
Pavol Tisovský, Miroslav Horváth, Jana Donovalová, Anton Gáplovský

Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Chemický ústav, Ilkovičova 6, 84215 Bratislava, pavol.tisovsky@uniba.sk

Fotokontrola hostiteľských molekúl otvorila nové pole v oblasti chémie. Makrocyclické polyétery predstavujú intenzívne študovanú skupinu zlúčenín, avšak možnosť fotokontrolovaného viazania iónov kovu bola opísaná len v niekoľkých prácach. Crown-éterový skelet bol úspešne skombinovaný s azobenzénom za účelom fotokontrolovaného viazania iónov kovov [1]. Značné úsilie v tejto oblasti bolo venované aj štúdiu tioindigových derivátov obsahujúcich rôzne dlhé oxyetylénové reťazce [2]. Na viazanie, uvoľňovanie a transport cez organické membrány

bol úspešne využitý aj tioindigový derivát obsahujúci crownéterový fragment [3].

V rámci tejto práce sme študovali možnosť využitia izatínových derivátov (Obrázok 1) na fotochemicky kontrolované viazanie resp. uvoľňovanie katiónov kovov.



Obr. 1. Využitie izatínových derivátov pri viazaní/uvolňovaní katiónov kovov.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APVV-15-0087.

- [1] S. Shinkai, T. Nakaji, Y. Nishida, T. Ogawa, O. Nanabe *J. Am. Chem. Soc.* 1980, 102, 5860-5865.
- [2] S. M. Fatah-ur Rahman, K. Fukunishi, M. Kuwabara, H. Yamanaka, M. Nomura *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, 1993, 66, 1461-1465.
- [3] S. M. Fatah-ur Rahman, K. Fukunishi *J. Am. Chem. Soc., Chem Commun.* 1994, 917-918.

PREDNÁŠKY - SEKCIA 6 POLYMÉRY

6P01

SUPRAMOLEKULÁRNÍ SAMOUSPOŘÁDANÉ POLYMERNÍ SYSTÉMY PRO DIAGNOSTIKU A TERAPII

Martin Hrubý, Lenka Loukotová, Jan Kučka, Maria Rabyk, Jiří Trousil, Tomáš Urbánek, Jiří Pánek, Volodymyr Lobaz, Kristýna Kolouchová, Pavel Švec, Miroslav Vetrík, Lucie Kománková, Ondřej Sedláček, Petr Štěpánek

Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v. v. i.,
Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6, Česká republika
mhruby@centrum.cz

Supramolekulární samouspořádané systémy jako jsou například cytoplazmatická membrána, ribozóm nebo multienzymové komplexy typu proteazómu jsou klíčovými stavebními prvky všech živých organismů. Pokud jsou vytvořeny ze syntetických polymerů, mohou sloužit například jako sofistikované efektivní dopravní systémy bioaktivních složek pro diagnostiku a terapii. Použitím polymerů citlivých na vnější podněty, jako je například změna pH, teploty nebo redoxpotenciálu k jejich konstrukci lze dále rozšířit jejich možnosti použití. Budou prezentovány příklady takovýchto supramolekulárních systémů - polymerní teranostické systémy pro binární radioimunoterapii, nanočásticová dvojfázová

radiodiagnostika s anorganickým jádrem a polymerním obalem nebo polymerní micely pro zobrazení ^{19}F -magnetickou rezonancí, léčbu intracelulárních bakteriálních infekcí či hojení ran.

Autoři děkují za finanční podporu Ministerstvu školství České republiky (grant č. LM2015064 ERIC), Ministerstvu zdravotnictví České republiky (granty č. 15-25781a a 16-30544A) a Grantové agentuře České republiky (grant č. 16-03156S).

6P02

CATIONIC POLY(2-OXAZOLINES) FOR GENE DELIVERY

Maroš Smolíček¹, Zuzana Kroneková¹, Emi Haladjova², Stanislav Rangelov², Juraj Kronek^{*1}

¹Department for Biomaterials Research, Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 84541 Bratislava, Slovakia,
juraj.kronek@savba.sk

²Institute of Polymers, Bulgarian Academy of Sciences, acad. G. Bonchev st. 103-A, 1113 Sofia, Bulgaria

Poly(2-oxazolines) (POx) represent versatile building blocks for different biomedical devices for drug or gene delivery [1]. Living cationic polymerization of 2-oxazolines allows to prepare polymers with controlled size, architecture, and functional groups. Cationic poly(2-oxazoline)s represent a special class of POx containing amino groups in the structure [2]. Moreover, combination of cationic units with biocompatible poly(2-methyl-2-oxazoline) (PMeOx) or poly(2-ethyl-2-oxazoline) (PEtOx) leads to preparation

of non-toxic polycations up to 60-65 % of cationic units [3].

Our work was focused on the preparation of cationic POx using two-step synthesis. First, PMeOx was prepared by living cationic polymerization of 2-methyl-2-oxazoline. Second step was based on an acidic hydrolysis of PMeox leading to poly(2-methyl-2-oxazoline-co-ethylene imine) (PEtOx-co-PEI) with various content of cationic PEI (Fig. 1). Non-toxic character of PMeOx-co-PEI was demonstrated by *in vitro* MTT assay.

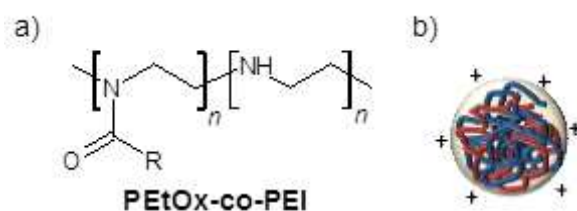


Fig. 1. Cationic poly(2-oxazolines) for gene delivery. a) Structure of PMeOx-co-PEI, b) Schematic representation of polyplex particle based on PMeOx-co-PEI.

PMeOx-co-PEI were used for complexation with DNA. Well defined particles of small size (ranging from 70 to 240 nm) and narrow size distribution were received. The effect of degree of polymerization of copolymers on the size and zeta potential of the resulting DNA/polymer complexes was observed. The polyplexes demonstrated good colloidal stability making them promising gene vector systems.

Authors are thankful the Slovak Grant Agency VEGA for the financial support in the project No. 2/0163/15 and the Slovak Research and Development Agency for financial support in the project No. APVV-15-0485.

- [1] R.Hoogenboom, *Angew. Chem. Int. Ed.* 48:7978–7994 (2009)
- [2] A.C. Rinkenauer, L. Tauhardt, F. Wendler, K. Kempe, M. Gottschaldt, A. Traeger, U.S. Schubert, *Macromol. Biosci.* 15:414–425 (2015)
- [3] R. Shah, Z. Kroneková, A. Zahoranová, L. Roller, N. Saha, P. Saha, J. Kronek, *J. Mater. Sci. Mater. Med.* 26:157 (2015)

6P03

IMUNORADIOTERAPEUTICKÝ HYBRIDNÍ POLYMERNÍ SYSTÉM

Lenka Loukotová¹, Jan Kučka¹, Martin Hrubý¹, Maria Rabyk¹, Pavla Francová², Věra Kolářová², Petr Páral², Tomáš Heizer², Luděk Šefc²

¹Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v. v. i., Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6, Česká republika;
jkucka@centrum.cz

²Centrum pokročilého preklinického zobrazování (CAPI), 1. lékařská fakulta UK, Salmovská 3, 120 00 Praha 2, 120 00, Czech Republic

Termoresponzivní polymery nesoucí vhodný radionuklid jsou slibnými kandidáty pro lokální radioterapii pevných nádorů [1]. Jejich účinek je však limitován lokální aplikací a použitým radionuklidem, vzdálené metastázy jsou mimo jejich účinný dosah. Navázáním vhodného imunomodulátoru by mohl být protinádorový účinek systémový. Očekávaným efektem je aktivace imunitního systému proti determinantám nádorových buněk usmrčených radiací a radiací eliminace zejména regulačních T-lymfocytů (T-reg buněk) umožňujících skrytí nádoru před imunitním systémem. Podobně jako klasické očkování zamýšlený efekt by mohl být dlouhodobě ochranný před návratem nádorového procesu.

Termoresponzivní kopolymer β -glukan-graft-poly(2-alkyl-2-oxazolin) nesoucí fluorescenční barvivo Dy615 a chelatující skupinu (DOTA) byl radioaktivně označen ⁹⁰Y a injikován do nádoru experimentálních zvířat (myši samice kmene C57BL/6 nesoucí nádorovou linií EL4). Byla sledována velikost nádoru, hmotnost a přežívání pokusných zvířat a jejich krevního obraz. Vyléčeno bylo 46 % pokusných zvířat.

Potřebná doba setrvání léčiva v nádoru byla ověřena fluorescenčně a pomocí Čerenkovova záření. Vyléčeným zvířatům bylo po 60 dnech retransplantováno opět 10⁵ buněk (EL4) a růst nádoru doba přežití je sledována ve srovnání s druhou kontrolní skupinou.

Autoři děkují za finanční podporu Ministerstvu školství České republiky (grant č. LM2015064 ERIC, SVV 260 371 / 2017 a LM2015062 Czech-BioImaging), Ministerstvu zdravotnictví České republiky (grant č. 15-25781a) a Grantové agentuře České republiky (grant č. 16-02870S).

- [1] Hruby M., Kučka J., et al., Thermoresponsive polymeric radionuclide delivery system-An injectable brachytherapy, *European Journal of Pharmaceutical Sciences* (2011)

6P04**VÝVOJ NOVÝCH TYPŮ DERIVÁTŮ KYSELINY HYALURONOVÉ S AKTIVNÍ LÁTKOU POUŽÍVANÉ PRO PŘÍPRAVU VLÁKEN**

Jana Baťová¹, Tomáš Pitucha¹, Jiří Běťák¹, Kateřina Knotková¹, Martin Pravda¹, Vladimír Velebný¹

¹ Contipro a.s., Dolní Dobrouč 401, 561 02 Dolní Dobrouč, Česká Republika
Jana.Batova@contipro.com

Tento příspěvek je zaměřený na vývoj nových derivátů hyaluronanu s aktivními látkami, které budou dále sloužit pro přípravu nekonečných vláken případně nanovláken. Derivatizace hyaluronanu je provedena pomocí protizánětlivých léčiv nebo jiných aktivních látek obsahující ve své struktuře karboxylovou skupinu. Modifikace hyaluronanu je založena na elektrofilní substituci protonu hydroxylu C6 *N*-acetylglukosaminu pomocí aromatické aktivní látky s karboxylem za vzniku esterové vazby. Tento typ vazby je pro vnitřní aplikace upřednostňován pro jejich možnou biologickou odbouratelnost prostřednictvím esteráz.

Z důvodu zachování žádaných biologických vlastností materiálu je nezbytné zvolit takovou acylační metodu, která bude probíhat za mírných podmínek a s dostatečně vysokou efektivitou bez vzniku vedlejších produktů. Proto byla zvolena jedнокroková syntéza vycházející z kyselé formy hyaluronanu a karboxylové kyseliny aktivní látky prováděná v bezvodém dimethylsulfoxidu. K zefektivnění reakce byl jako nejvhodnější aktivátor karboxylu aktivní látky vybrán 1-ethyl-3-(3-dimethylaminopropyl) karbodiimid kombinovaný s *N*-hydroxysukcinimidem (EDC/NHS).

Vzniklý derivát lze dále zpracovávat do formy nekonečných vláken případně nanovláken pomocí mokrého zvlákňování či elektrospinningu. Po zpracování vláken do finální podoby může být výsledný materiál využíván v různých odvětvích medicíny (například v chirurgii a traumatologii). Navázání aktivní látky na hyaluronan kovalentní vazbou navíc zaručuje materiálu vyšší stabilitu při skladování i při aplikacích.

6P05**BONDING PROPERTIES OF ACRYLONITRIL BUTADIENE RUBBER WITH POLYAMIDE MEDIATED BY A FUNCTIONAL LAYER OF SILANE COUPLING AGENT**

Jing Sang¹, Sumio Aisawa¹, Hidetoshi Hirahara¹, Kunio Mori^{1,2}

¹Department of Frontier Materials and Function Engineering, Graduate School of Engineering, Iwate University, 4-3-5 Ueda, Morioka 020-8551, Japan
sangjing@iwate-u.ac.jp

²Sulfur Chemical Laboratory, 210, Collabo MIU, 4-3-5, Ueda, Morioka 020-0066, Japan

The development of low material-consuming adhesion techniques for different kinds of materials such as rubber and resin with much lighter materials replacing steel in some applications is important for the realization of sustainable societies.

This study demonstrates that coating layers, expected to be formed as self-assembled monolayers, of silane coupling agents can act as adhesion layers as the hydrogenated acrylonitrile butadiene rubber (HNBR) and polyamide (PA6) plate interfaces. The resulting PA6/HNBR joints showed excellent adhesion properties with cohesive failure and the interfaces were jointed through chemical bonds, which were confirmed by swelling tests. The surfaces and bonding properties of rubber and PA6 were studied by means of peel tests, X-ray photoelectron spectroscopy (XPS), transmission electron microscopy (TEM), and nanoscale infrared microscopy and chemical imaging (AFM-IR). The AFM-IR was employed to analyze the chemical structures of the adhesion interfaces between HNBR and PA6. Through these analyses it is clarified that a large number of Si-O-Si bonds form at the interfaces and weaken the adhesion layer. Additionally, the chemical structures and the formation mechanism of the adhesion interfaces between HNBR and PA6 were investigated.

This study is significant value for interface research and the study of adhesion between resins and rubbers.

Acknowledgements. This work was supported by the Council for Science, Technology and Innovation (CSTI), “Innovative Design/Manufacturing Technologies” of the Cross-Ministerial Strategic Innovation Promotion Program (SIP)

6P06**VÝSKUM VPLYVU NÍZKOTEPLNOTNEJ PLAZMY NA ZVÝŠENIE PERMANENTNOSTI POVRCHOVEJ ÚPRAVY TEXTILNÝCH MATERIÁLOV S POUŽITÍM NANOSÓLOV**

Zdenko Špitalský¹, Mária Kováčová¹, Ondrej Žigo¹, Igor Novák¹, Angela Kleinová¹, Matej Mičušík¹, Zuzana Nógellová¹, Dana Rástočná Illová²

¹Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava

zdeno.spitalsky@savba.sk

²VÚTCH-Chemitex, Rybníky 954, 011 68 Žilina

Predmetom výskumu je štúdium vzťahov medzi účinkami vyvolanými nízkoteplotnou plazmou (napr. tvorba voľných radikálov) na iniciovaný povrch textilných materiálov zo syntetických vlákien (PP, PES, PA) resp. ich zmesi (PES/bavlna) a aplikovaným typom povrchovej úpravy textílie prostredníctvom nanosólu. Vytvorili sa tak predpoklady zvýšenia permanentnosti nanopovrstvenia textílií s použitím hydrofóbných, hydrofilných, elektrovodivých a antimikrobiálnych nanosólov po ich údržbe. Výskumne sa pripravili podmienky pre multifunkčnú povrchovú úpravu textílií s cieľom zvýšenia ich funkčných a úžitkových vlastností.

Podakovanie: Autor by sa rád poďakoval za podporu projektu APVV Výskum vplyvu nízko-teplotnej PLAZmy na zvýšenie povrchovej permanentnosti úpravy TEXTILNÝCH materiálov s použitím NANOsólov (APVV-14-0518).

6P07**POLYMERNÍ SYSTÉMY MODIFIKOVANÉ UHLÍKOVÝMI NANODESTIČKAMI**

Ivan Kelnar, Ludmila Kaprálková

Ústav makromolekulární chemie AVČR, v.v.i., Heyrovského n. 2, 16206 Praha 6
kelnar@imc.cas.cz

Přednosti nanoplňiv (NP) aplikovaných v polymerech jsou nejlépe využity ve vícesložkových matricích a mikrofibrilárních polymer-polymer kompozitech. Důvodem je skutečnost, že vyztužení a zlepšení mnoha materiálových parametrů je doprovázeno rovněž významným ovlivněním vlastností mezifáze a struktury včetně tvorby efektivních organicko-anorganických struktur jako nanolamelární, směsné a „core shell“ inkluze. To může vést k materiálům s unikátními vyváženými vlastnostmi. Rozhodujícím parametrem je afinita

NP k polymerům, ovlivňující rovněž jejich lokalizaci, kterou lze řídit modifikacemi NP. V poslední době byla zjištěna daleko vyšší účinnost uhlíkových nanodestiček (CN), jak z důvodu lepších mechanických vlastností, tak afinity k polymerům. Pro aplikaci v polymerních směsích je důležité, že efektivní příprava CN oxidačními postupy vede k významnému obsahu funkčních skupin vhodných pro řadu následných kovalentních modifikací včetně in-situ reakcí v polymerních systémech. Oxidované CN mají rovněž amfifilní charakter výhodný pro regulaci struktury.

V práci je studována aplikace CN v PA6 modifikovaném elastomerními nebo tuhými inkluzemi. Je diskutován vliv vzniklých struktur na vlastnosti a deformační mechanismus. Aplikace CN ve směsích PCL s PLA vede k transformacím struktury a umožňuje přípravu mikrofibrilárních kompozitů i analogických unikátních vláken s PCL matricí. Výsledky dokládají vyšší účinnost a komplexnost působení CN v polymerních směsích ve srovnání s anorganickými nanoplňivy.

Práce vznikla s podporou Grantové agentury České republiky (Grant No 16-03194S)

6P08**POLYMÉRNE KOMPOZITY PRE 3D TLAČ**

Zdenko Špitalský¹, Janka Kozakovičová¹, Mária Kováčová¹, Michal Procházka¹, Ondrej Žigo¹, Katarína Csomorová¹, Marek Vysopal²

¹Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava

zdeno.spitalsky@savba.sk

²Mymedia s. r. o., Tomášikova 30, 821 01, Bratislava

Práca sa zaoberá prípravou polymérnych kompozitných materiálov s využitím pre 3D tlač technológiou modelovania depozíciou taveniny - fused deposition modeling (FDM). Pripraveným kompozitným materiálom na báze PETG a recyklovaného PETG boli zisťované mechanické vlastnosti, materiály boli podrobené termogravimetrickej analýze, dynamicko-mechanickej analýze, dielektrickej spektroskopii, analýze zmáčavosti, a pozorovaniu pod rastrovacím elektrónovým mikroskopom. Ako plnivo bol použitý expandovaný grafit a uhlíkové vlákna. Všetky pripravené kompozitné materiály boli vhodné na 3D tlač pomocou technológie FDM, majú vyšší Youngov modul a vyšší elastický modul pri 25 °C ako PETG bez plniva. Prídavok plniva do polymérnej matrice mal len

malý vplyv na teplotu sklovitého prechodu a na termickú stabilitu. Pripravené kompozitné materiály na báze recyklovaného PETG mali porovnateľné vlastnosti s kompozitmi na báze PETG, čo má ekonomický a ekologický význam. Nové a lacnejšie materiály môžu prispieť k rozšíreniu 3D tlače do výrobných závodov a použitiu 3D tlačiarň na špeciálne aplikácie.

Podakovanie: Výskum bol podporený z projektu VEGA 2/0093/16.

6P09

ZMES GLYCERÍNU A MOČOVINY AKO ZMÄKČOVADLO NA PRÍPRAVU TERMOPLASTICKÉHO ŠKROBU

František Ivanič¹, Ivan Chodák¹

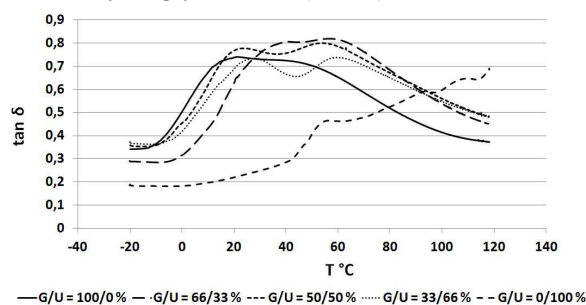
¹Ústav polymérov Slovenskej akadémie vied,
Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava
frantisek.ivanic@savba.sk

Je známe, že neupravený škrob nie je možné spracovať bežnými spracovateľskými technikami polymérov. Spracovanie v tavenine sa spravidla realizuje až po termomechanickej úprave škrobu v prítomnosti zmäkčovadla [1]. Úlohou zmäkčovadla je rozrušenie chemických väzieb čo vedie k vyššej pohyblivosti reťazcov škrobu [2] a následnému poklesu T_g [3]. Použitie rôznych zmäkčovadiel poskytuje širokú škálu možností modifikácie fyzikálnych vlastností. V prípade použitia zmesi zmäkčovadiel môže dôjsť k prípadnému synergickému efektu.

Preverovali sme konečné vlastnosti termoplastického škrobu pripraveného s použitím zmesi glycerínu, ako bežne používaného zmäkčovadla a močoviny, ktorá by mala so škrobom vytvárať pevnejšie vodíkové väzby. Pre stanovenie fyzikálnych vlastností a štruktúry termoplastického škrobu sa použila reometria a metódy DMTA a DSC.

Experimenty ukázali, že pevnosť v ťahu je oveľa vyššia v prípade materiálu zmäkčeného močovinou v porovnaní so škrobom zmäkčeným glycerínom. V zmesi plastifikátorov glycerín / močovina mal prípadok močoviny len mierny vplyv na nárast pevnosti v ťahu. Teplota želatinácie (T_{gel}) škrobu v prítomnosti močoviny je podstatne nižšia v porovnaní so samotným škrobom. Hodnoty T_{gel} pre zmes močovina/glycerín sú takmer aditívne v závislosti od zloženia zmesi zmäkčovadiel. T_g močovinou zmäkčeného škrobu stanovené DMTA (Obr. 1),

je oveľa vyššia (56 °C) v porovnaní s materiálom zmäkčeným glycerínom (21 °C).



Obr. 1. Hodnoty $\tan \delta$ pre škrob so zmesou zmäkčovadiel ako funkcia % glycerínu (G) v zmesi s močovinou (U) pri konštantnom pomere škrob/zmäkčovadlá = 100/60.

Acknowledgement: Projekty APVV 15-0741 and VEGA 1/0570/17

- [1] M. Li, J. Hasjim, F. Xie, P. J. Halley, and R. G. Gilbert, "Shear degradation of molecular, crystalline, and granular structures of starch during extrusion," *Starch - Stärke*, vol. 66, no. 7–8, pp. 595–605, Jul. 2014.
- [3] N. Laohakunjit and A. Noomhorm, "Effect of Plasticizers on Mechanical and Barrier Properties of Rice Starch Film," *Starch - Stärke*, vol. 56, no. 8, pp. 348–356, Aug. 2004.
- [4] H. A. Pushpadass, D. B. Marx, and M. A. Hanna, "Effects of Extrusion Temperature and Plasticizers on the Physical and Functional Properties of Starch Films," *Starch - Stärke*, vol. 60, no. 10, pp. 527–538, Oct. 2008.

6P10

CONFOCAL RAMAN MICROSCOPY OF HYDROGEL MICROSPHERES

Zuzana Kroneková,¹ Michal Pelach,² Petra Mazancová,¹ Lucia Uhelská,¹ Dušana Treľová,¹ Filip Rázga,¹ Veronika Némethová,¹ Vladimír Raus,^{1,3} James J. McGarrigle,⁴ José Oberholzer,⁴ Peter Šiffalovič,² Igor Lacík¹

¹Department for Biomaterials Research, Polymer Institute of the Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, Slovakia, zuzana.kronekova@savba.sk

²Department of Multilayers and Nanostructures, Institute of Physics of the Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 11 Bratislava, Slovakia

³Institute of Macromolecular Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, Heyrovsky Sq. 2, 162 06 Prague 6, Czech Republic

⁴Division of Transplantation, Department of Surgery, University of Illinois at Chicago, 840 South Wood Street, Chicago, Illinois 60612, USA

Hydrogel microspheres used for cell encapsulation have to fulfill a number of physico-

chemical and biological requirements [1]. In order to carry out rational optimization of the hydrogel biomaterial, detailed understanding of its characteristics is required. The principal characteristics include chemical composition, morphology and spatial distribution of polymers, with the last one being of primary concern lately. The state-of-the-art method for studying spatial distribution of polymers in microspheres is confocal laser scanning microscopy (CLSM) [2]. The current trends in transplantation studies reveal a strong need to characterize the structural changes in hydrogel microspheres resulting from their implantation to animal models. Here the CLSM is insufficient as polymers used for encapsulation shall not be chemically modified, i.e. fluorescently labeled. We propose that confocal Raman microscopy (CRM) can be an alternative to CLSM. The advantages of CRM include a relatively simple sample preparation, no fluorescent labelling and the possibility to carry out the analysis under native conditions, which makes CRM suitable for analyzing materials such as hydrogels, polymeric scaffolds and biological systems [3]. In this contribution, we focus on utilization of the CRM technique in study of alginate microbeads and sodium alginate-cellulose sulfate-poly(methylene-cyanoguanidine) microcapsules (so called PMCG microcapsules) used for immobilization of living cells.

Authors are grateful for funding to Slovak Research and Development Agency under the grant APVV-15-0227, the VEGA grant No. 2/0059/16 and 2/0156/15, the Juvenile Diabetes Research Foundation under the grant No. 2-SRA-2014-288-Q-R and to The Chicago Diabetes Project. F. Rázga is receiving support within the SASPRO Programme (project No. 0057/01/02), co-funded by the European Union and the Slovak Academy of Sciences.

- [1] Rokstad, A.M., Lacík, I., de Vos, P., Strand, B.L. *Adv. Drug. Deliv. Rev.* **67-68**, 111-130 (2014)
- [2] Lacík, I., Chorvát, Jr. D. in *The bioartificial pancreas and other biohybrid therapies*, Halle, (ed. Halle, J. P., de Vos, P., Rosenberg, L.) 137-175 Research Signpost, (2009)
- [3] Kann, B., Offerhaus, H. L., Windbergs, M., et al. *Adv. Drug. Deliv. Rev.* **89**, 71-90 (2015)

6P11

AUTOFLUORESCENCE OF ANTHRACYCLINES OBSERVED BY FLIM

Jiří Pánek¹, Olga Janoušková¹, Ondřej Sedláček¹, Martin Hrubý¹, Petr Štěpánek¹

¹Ústav makromolekulární chemie AV ČR v.v.i.,
Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha
panek@imc.cas.cz

Advanced fluorescence detection methods - especially fluorescence lifetime imaging microscopy (FLIM) and fluorescence lifetime correlation spectroscopy (FLCS) [1] - can be used for the detailed analysis of biological behavior of certain nanotherapeutics due to their intrinsic fluorescence. Since contrast of an FLIM image is based upon the lifetime of a fluorophore, FLIM may serve as a tool to display distributions of different states of fluorophores within the sample [2].

In this contribution we describe a study on distributions of anthracycline drugs pirarubicin and doxorubicin and their polymer conjugates within living cells. We report application of a specific technique for processing FLIM images, called fluorescence pattern decomposition [3], to evaluate early events after doxorubicin or pirarubicin treatment of cells. Moreover, we characterized changes in the intracellular localization and release of the anthracyclines during the incubation of cells with polymer nanotherapeutics.

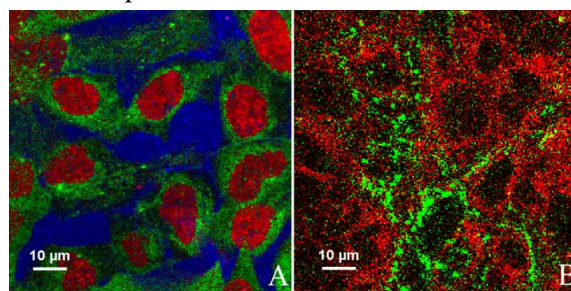


Fig. 1. Fluorescence pattern distributions detected after 30-minute incubation of DLD1 cells with initially free drug and polymer-drug conjugate.

The work was supported by the Ministry of Education, Youth and Sports of CR, Project LM2015064.

- [1] Dertinger, T. and S. Rüttinger in *Advanced Photon Counting: Applications, Methods, Instrumentation*, ed. P. Kapusta, M. Wahl, and R. Erdmann (Springer International Publishing: Cham, 2015), p. 89.
- [2] Ruedas-Rama, M.J., et al., *Analyst*, **137** (2012), p. 1500.
- [3] Gregor, I. and M. Patting in *Advanced Photon Counting: Applications, Methods,*

Instrumentation, ed. P. Kapusta, M. Wahl, and R. Erdmann (Springer International Publishing: Cham, 2015), p. 241.

6P12

STRUCTURE OF LINEAR AND RING MACROMOLECULES CONFINED IN ARRAY OF NANOPOSTS

Zuzana Benková,^{1,2} Lucia Rišpanová,¹ Peter Cifra¹

¹*Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, Slovakia,*

²*LAQV@REQUIMTE, Department of Chemistry and Biochemistry, Faculty of Sciences, University of Porto, Rua do Campo Alegre 687, 4168-007 Porto, Portugal, cifra@savba.sk*

The function of biomacromolecules in living systems is dictated by their conformation which is considerably modified in geometrically confined or crowded spaces. Thus, knowing the conformation of confined biopolymers is inevitable for understanding the biochemical processes. Single-chain experiments are realized in microfluidic devices. In these experiments, a chain is confined in a rectangular channels. The theory of a single linear chain confined in a channel or slit is elaborated and supported by a number of simulation studies. A special situation appears when a chain is confined in an array of posts that might be approximated as a system composed of quasi-channels mutually interconnected through a passage between adjacent posts. Recently, arrays of nanoposts have been pointed out as efficient substitutes for gels in electrophoretic devices [1]. This study is focused on the effect of chain stiffness and topology on the structural properties of a polymer chain in an array of nanoposts. The structural behavior of a linear flexible and semiflexible (DNA) chain is compared with its circular analogue. Although, the simulations of a linear flexible chain confined in an array of nanoposts have been reported [2], the behavior of a circular chain in an array of nanoposts has not been studied yet. Moreover, the combination of the confinement due to a nanopost array and the continuous variation of the chain stiffness on the chain conformation have not been addressed in systematic manner yet. The number of occupied interstitial spaces is evaluated in order to explain the non-monotonic variation of the chain extension with the post diameter. The asymmetry in the chain expansion with respect to the post axes is scrutinized and explained. The system of post arrays is approximated as a combination of a

quasi-channel and a quasi-slit like geometry. The interstitial spaces are viewed as being of a channel geometry while the passage between two adjacent posts are viewed as being of a slit geometry. Generally, stiffer chains tend to penetrate more readily in the direction perpendicular to the post axes and thus to occupy more interstitial volumes. This is consistent with the prediction of free energy penalty that is lower for stiffer chain at strong confinement.

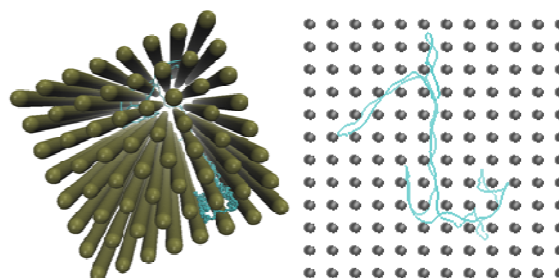


Fig. 1. Snapshots of linear flexible and semiflexible chain and a circular DNA-like chain in the array of nanoposts, top view.

Acknowledgement: This work was supported by following grants, SRDA-15-0323, VEGA 2/0098/16 and VEGA 2/0055/16. Z.B. thanks also to NORTE-01-0145-FEDER-000011.

- [1] Volkmuth W. D., Austin R. H. *Nature* **358**, 600-602, 1992.
- [2] Joo H., Kim J. S. *Soft Matter* **11**, 8262-8272, 2015.

6P13

FUNCTIONAL POLYESTERS FROM TULIPALINE A AND ϵ -CAPROLACTONE.

Martin Danko¹, Slávka Ďurkáčová¹, Jaroslav Mosnáček¹

¹*Polymer Institute SAS, Dúbravská cesta 9, 84541 Bratislava, Slovakia
martin.danko@savba.sk;*

The five-membered γ -butyrolactone derivatives would be a desirable bio-derived monomers for production of biodegradable polyesters as these lactones are available from renewable sources or can be isolated from plants. Among them Tulipaline A (α -methylene- γ -butyrolactone, α -MBL) possesses double functionality of exo-cyclic double bond and lactone ring and can be polymerized in controlled processes by radical (including ATRP) or via ring-opening (ROP) polymerizations [1,2]. The selection of the appropriate catalytic system influences the rate of polymerization reaction (undesirable side reaction as well) and dispersity ($\bar{M}_w/\bar{M}_n$) of final polymer. Up to date there are published just

few ROP copolymerizations of ϵ -CL and α -MBL, while lanthanide complexes and $\text{Bi}(\text{OTf})_3$ were used as catalysts [3].

Employment ROP using $\text{Al}(\text{OiPr})_3$ catalyst enabled preparation of statistic copolymer PMBL-co-PCL with $M_n = 6\text{--}100 \text{ kg mol}^{-1}$ and low dispersity ($\text{Đ} \sim 1.11\text{--}1.51$). The amount of incorporated α -MBL units was 3–25 mol%; higher α -MBL percentage was found in feeds with higher α -MBL/CL ratio. Increased temperature (over 60°C) and/or changed solvent (THF instead toluene) caused formation of PMBL homopolymer side-product by radical polymerization. The decreasing of reaction temperature from r.t. to 0°C led to enhanced MBL incorporation from 5 to 7 mol% in the case of 1/1 feed MBL/CL ratio, from 13 to 16 mol% for 5/1 feed MBL/CL and from 17 to 25 mol% for 10/1 feed ratio.

Acknowledgement: The authors thank to the Grant agency VEGA for grant nr. 2/0158/17 and to Slovak Research and Development Agency APVV through grant APVV-14-0932.

- [1] Mosnáček J., Matyjaszewski K.: *Macromolecules*, 2008, 41, 5509.
- [2] Tang, X., Hong, M., Falivene, L., Caparoso, L., Cavollo, L., Chen, E.Y.X.: *JACS*, 2016, 138 (43), 14326.
- [3] Hong M., Chen E.: *Macromolecules*, 2014, 47, 3614.

6P14

ČÁSTICE POLY(ϵ -KAPROLAKTON-CO- γ -BUTYROLAKTON)U PRO MEDICÍNSKÉ POUŽITÍ

Tomáš Urbánek¹, Jiří Trousil¹, Peter Černočh¹, Soňa Hermanová², Martin Hrubý¹

¹Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v. v. i., Heyrovského nám. 2, 166 06 Praha 6
mhruby@centrum.cz

²Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika

Alifatické polyesteru a jejich kopolymery jsou pro své příznivé mechanické a biologické vlastnosti široce využívány při biomedicínálních aplikacích. V této práci byly využity různé iniciační systémy a měněny polymerizační podmínky pro přípravu poly(ϵ -kaprolakton-co- γ -butyrolakton)u o různých molárních hmotnostech a množstvích opakujících se jednotek γ -butyrolaktonu. Dále bylo provedeno studium chemické kinetiky pro kopolymerizaci s nejúčinnějším iniciačním systémem. Ze syntetizovaného kopolyesteru byly připraveny

nanočástice a byl studován i vliv přídavku surfaktantů. Zároveň byla studována enzymatická degradace těchto nanočástic v přítomnosti bakteriální a savčí lipázy při pH 5 a 7.4. Předpokládá se, že při degradaci se uvolňuje 4-hydroxybutyrát, který může mít pozitivní terapeutický účinek, zejména při léčbě zánětlivých onemocnění.

Tato práce vznikla za podpory grantů GA ČR 17-07164S a 17-09998S.

6P15

POLY(ϵ -CAPROLACTONE)-CLAY NANOCOMPOSITES

Michaela Sednicková¹, Daniela Joheć Mošková¹, Ivica Janigová¹, Juraj Kronek¹, Luboš Jankovič², Miroslav Šlouf³, Ivan Chodák¹

¹Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, Slovakia,
michaela.sednickova@savba.sk

²Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, Slovakia

³Institute of Macromolecular Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, Heyrovského sq. 2, 160 06 Prague, Czech Republic

Montmorillonite (MMT) used as a filler was separated from a deposit Jelšovský Potok bentonite Slovakia. MMT was saturated with Na cation resulting in natrification of the filler (Na-MMT) and subsequently was modified by three ammonium salts to achieve exchange of Na cation with selected organic cations: octadecyltrimethylammonium (ODTMA), oleyltrimethylammonium (OLEYL) and (9,10-dihydroxyoctadecyl)trimethylammonium (OH-ODTMA). The PCL-clay nanocomposites were prepared by melt intercalation of biodegradable poly(ϵ -caprolactone) matrix (PCL 6800) with 1, 3, 5 and 10 wt% of MMT fillers in the mixing chamber. The modification of MMT with organic cations resulted in the increase of compatibility with the PCL matrix, confirmed by the results of mechanical properties, rheological measurements and transmission electron microscopy (TEM). The rising content of modified MMT fillers led to the increase of Young's modulus and decrease of tensile strength and elongation at break. The rheological behaviour allowed to indicate the interaction between polymer matrix and fillers which was monitored in the region of low frequencies. The achieved results were completed analysing morphology of PCL-clay nanocomposites by TEM.

This work was supported by the projects APVV 0741-15, APVV 0566-15 and VEGA 2/0108/14.

6P16

USPOŘÁDANÉ ALIFATICKÉ POLYURETHANOVÉ ELASTOMERY JAKO MATRICE PRO INTELIGENTNÍ SAMOREGENERUJÍCÍ SE MATERIÁLY

Milena Špírková¹, Libor Matějka¹

¹ Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i.,
Oddělení nanostrukturovaných polymerů a kompozitů,
Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6
spirkova@imc.cas.cz

Byly připraveny a charakterizovány lineární, vysoce uspořádané polyurethanové elastomery z makrodiolu na bázi polykarbonátu, 1,6-

diisokyanátohexanu a 1,6-hexandiolu. Tento produkt termoplastického charakteru, vyznačující se mj. vynikajícími mechanickými vlastostmi, je testován jako matrice pro kompozitní systémy perspektivně použitelné jako inteligentní samoregenerující se materiály o vysoké mechanické pevnosti.

Z měření statických a dynamických mechanických vlastností, termálních a mikroskopických analýz vyplývá, že finální vlastnosti těchto produktů je možné ve značném rozsahu modifikovat molárním poměrem makrodiol:hexandiol.

Poděkování: Příspěvek vznikl za podpory projektu č. 17-13103S Grantové agentury České republiky.

PREDNÁŠKY - SEKCIA 7 JADROVÁ CHÉMIA

7P01

SKÚSENOSTI Z VÝROBY RÁDIOFARMÁK NA SLOVENSKU

Pavol Rajec

BIONT a.s. Karloveská 63 842 29 Bratislava
rajec@biont.sk

Súbežne so zavádzaním PET tomografie v SR vznikla výzva na zabezpečenie diagnostických rádiofarmák, ktoré pre krátku až ultrakrátku expiračnú dobu (hodiny až minúty) sa nevýhodne alebo vôbec nedali zabezpečiť pre PET pracoviská nukleárnej medicíny. Na Slovensku pritom boli skúsenosti len v oblasti základného výskumu, osobitne chémie a farmácie technécia (Katedra jadrovej chémie PriFUK, Katedra farmaceutickej analýzy a nukleárnej farmácie FaFUK). Výrobou rádiofarmák sa zaoberali v ČSSR federálne ústavy (ÚVVR a ÚJV), ktoré po rozdelení Československa zostali v Českej republike. História výroby rádiofarmák na Slovensku je spojená s „Cyklotrónovým centrom Slovenskej republiky“, čo bol projekt štátnej investičnej výstavby, zabezpečovaný Úradom pre normalizáciu, metrológiu a skúšobníctvo SR od roku 1997.

V roku 2003 sa v Karlovej Vsi v Bratislave naprojektovala výroba na požadovanej

kvalitatívnej úrovni. Jej prevádzkovanie sa stalo predmetom obchodnej činnosti štátnej akciovej spoločnosti BIONT, a.s. zriadenej v roku 2005. Prevádzka sa primárne sústredila na výrobu v súčasnosti najvýznamnejšieho rádiofarmaka, [¹⁸F]fluórdezoxyglukózy (FDG). Prvá pilotná syntéza aktívnej farmaceutickej substancie FDG sa uskutočnila koncom roka 2004 a s rutinnou výrobou liekovej formy sa začalo už začiatkom roka 2006. Za obdobie 2006-2017 vývoja výroby PET rádiofarmák sa vyrobilo 2640 šarží FDG s aktivitou vyše 216 TBq, 500 šarží [¹¹C] metionínu s aktivitou vyše 3,5 TBq a 29 šarží [¹¹C] cholínu s aktivitou vyše 0,5 TBq pre pracoviská v SR, v Rakúsku a Českej republike. V súčasnosti má spoločnosť BIONT okrem básovej výroby FDG osvojenú a schválenú (alebo validovanú) výrobu skúšaných liekov na PET diagnostiku na báze fluóru-18 a uhlíka-11: [¹⁸F]fluórcholín (FCH), [¹⁸F]fluóretylytyrozin (FET) a pripravuje sa výroba liečiv na báze rádionuklidov Cu-64 a Ga-68.

7P02

MONITOROVANIE ENERGIE A PRÚDU PROTÓNOVÉHO ZVÄZKU AKTIVÁCIOU TITÁNOVÝCH A MEDENÝCH FÓLIÍ

Jaroslav Červenák¹, Ondřej Lebeda¹

¹Ústav jaderné fyziky Akademie věd České republiky,
Husinec – Řež 130, 250 68 Řež, Česká republika
cervenak@ujf.cas.cz

Aktivácia tenkých kovových fólií je spoľahlivou a lacnou metódou pre určovanie energie a prúdu zväzku nabitých častíc. To je dôvod, prečo je

nutné dobre poznať excitačné funkcie reakcií vedúcich na rádionuklidy vznikajúce pri tomto procese. Od roku 2001 IAEA na svojich internetových stránkach zverejňuje odporúčané dáta pre monitorovanie protónového a deuterónového zväzku a zväzku častíc α a ^3He . Táto databáza však bola aktualizovaná naposledy v roku 2007. Od vtedy bolo publikovaných niekoľko nových meraní excitačných funkcií, niektoré rozpadové charakteristiky rádionuklidov boli spresnené a zistil sa mierny systematický posun nameraných dát od odporúčaných hodnôt, a to hlavne v energetickom intervale 15–40 MeV.

Z tohto dôvodu sme premerali 12 excitačných funkcií reakcií protónov na medených a titánových fóliách sendvičovou metódou v energetickom rozsahu 6,44–35,97 MeV. V rámci týchto experimentov sme dôkladne zmerali aj aktivity rádionuklidov odrazených na nasledujúcu fóliu v sendviči. V prezentácii budú uvedené najpodstatnejšie výsledky.

7P03

ACTINOIDS / LANTHANOIDS SEPARATIONS BY NOVEL BTBP/BTPhen EXTRACTANTS

Petr Distler¹, Jan John¹

¹Department of Nuclear Chemistry, FNSPE CTU in Prague, Břehová 7, 115 19 Praha 1
john@fffi.cvut.cz

Management of the minor actinoids (Am, Cm) within a partitioning and transmutation strategy – selective separation followed by transmutation to shorter-lived radionuclides or stable elements – can lead to a significant decrease of volume of the final high-active waste, a decrease of its heat load allowing to decrease the footprint of the deep underground repository, and a reduction of the overall radiotoxicity to the environment and humans. This paper summarised two recent contributions to the partitioning of minor actinoids (MAN):

- *Extraction systems for trivalent lanthanoids and minor actinoids separation* – new tetra-sulfonated hydrophilic bis-triazinyl-bipiridines (BTBP) and bis-triazinyl-phenantrolines (BTPhen) synthesized by the University of Reading (UREAD) were demonstrated to be able to selectively complex Am(III) over Eu(III) across a range of nitric acid concentrations (0.3–0.8 mol/L HNO_3) with very high selectivities.

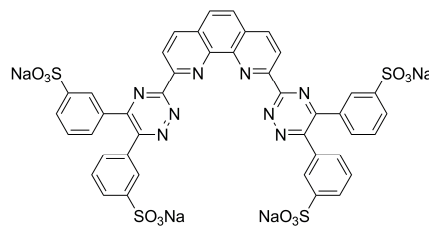


Figure 1. Structure of $(\text{PhSO}_3\text{Na})_2\text{-BTPhen}$.

- *Extracting compounds for solid-liquid extraction* – a series of materials containing BTBP or BTPhen moieties attached to core-shell magnetic nanoparticles (MNPs) was prepared by UREAD and studied in Prague. Different modifications were tested e.g. types of the magnetic cores (Fe vs. Fe_2O_3), types of the shells (SiO_2 vs. ZrO_2), or various ligand (BTBP or BTPhen) and their capability for sorption of Am(III) and Eu(III) were compared.

The systems studied may find applications in e.g. TALSPEAK process simplification or – e.g. the $\text{CyMe}_4\text{-BTPhen}$ on Fe_2O_3 MNPs with SiO_2 shell – for magnetically assisted MAN separation from various solutions.

The organic chemistry group at the University of Reading (prof. Laurence Harwood, Dr. Frank Lewis, Ashfaq Afsar) are acknowledged for the synthesis of the extractants.

7P04

RÝCHLE STANOVENIE ^{79}Se POMOCO KVAPALINOVEJ SCINTILAČNEJ SPEKTROMETRIE

Silvia Dulanská¹, Bianka Horváthová¹, Boris Remenec¹, Ľubomír Mátel¹

Katedra jadrovej chémie PríF UK, Ilkovičova 6,
Mlynská dolina, 842 15 Bratislava
dulanskas@gmail.com

Cieľom práce bolo aplikovať rýchlu metódu pre separáciu ^{79}Se vo vzorkách rádioaktívnych koncentrátoch z JE SR pre meranie ^{79}Se na LSC spektrometrii. Metóda destilácie bola použitá pre separáciu selénu vo vzorkách rádioaktívnych koncentrátoch z JE SR. V práci boli testované vhodné podmienky separácie v prostredí HBr a HCl , vplyv konkurenčných iónov ($^{99\text{m}}\text{Tc}$, ^{129}I , ^{137}Cs , ^3H , ^{14}C) a vplyv hmotnosti nosiča selénu pre meranie na kvapalinovom scintilačnom spektrometrii TRICARB 3100 TR v prostredí scintilačného kotailu ULTIMA GOLD AB. V práci boli stanovené vysoké dekontaminačné faktory v rádioaktívnych koncentrátoch a boli väčšie ako $4 \cdot 10^5$ pre ^{137}Cs , $1 \cdot 10^5$ pre ^{60}Co , $1 \cdot 10^6$ pre $^{99\text{m}}\text{Tc}$ a $2 \cdot 10^6$ pre ^3H . Výťažky selénu vo

vzorkách boli stanovené gravimetricky. Priemerné výťažky sa pohybovali v rozsahu (60-94) %. Na Slovensku na základe rozhodnutia Úradu jadrového dozoru SR je uzákonená povinnosť deklarovať 19 kritických rádionuklidov v rádioaktívnych odpadoch, medzi ktoré patrí aj ^{79}Se . Doba polpremeny ^{79}Se nie je jednoznačná, v niektorých odborných literatúrach sa doba polpremeny uvádza ako $T_{1/2} = 6,5 \cdot 10^4$ r, v iných $T_{1/2} = 1,13 \cdot 10^6$ r, $T_{1/2} = 295\,000$ r alebo $T_{1/2} = 3,7 \cdot 10^5$ r [1-3]. V práci sa povrdilo, že metóda destilácie ponúka jednoduchú, účinnú a rýchlu metódu pre stanovenie ^{79}Se v matrici akým je aj rádioaktívny koncentrát.

Pod'akovanie: Práca bola realizovaná vďaka podpore grantu KEGA 002UK-4/2016.

- [1] Ashworth, D.J., Shaw, G.: Soil migration, plant uptake and volatilisation of radio-selenium from a contaminated water table, *Science of the Total Environment* 370, 2006
- [2] Sarma, N.: Soil Microbe Interaction and its Impact on Selenium uptake by Allium species, Department of Biotechnology & Environmental Sciences, Thapar University, 2010
- [3] Lehto, J., Hou, X.: Chemistry and Analysis of Radionuclides, Laboratory Techniques and Methodology, 2011, ISBN 978-3-527-32658-7

7P05

KOMPOZITNÉ SORBENTY S OXIDOM MANGÁNU PRE ZAKONCENTROVANIE ALFA RÁDIONUKLIDOV

Silvia Dulanská, Ľubomír Mátel

*Katedra jadrovej chémie PriF UK, Ilkovičova 6, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava
dulanskas@gmail.com*

Cieľom práce bolo štúdiom možností zakoncentrovania alfa rádionuklidov z vodných roztokov pomocou dvoch kompozitných sorbentov so základnou zložkou MnO_2 . Nosičom pre sorpčný kompozitný materiál boli v prvom prípade uhlíkové vlákna a v druhom prípade bol sorbent pripravený pomocou sol-gél metódy. Sledovanými rádionuklidmi boli izotopy plutónia (^{242}Pu , ^{239}Pu) a amerícia (^{243}Am , ^{241}Am). Experimenty sa uskutočnili v statickom a dynamickom režime. Percento sorpcie bolo stanovené po desorpcii pomocou 3 mol.dm^{-3} kyseliny dusičnej a nasledovnej radiochemickej analýze pomocou TRU-Resin.

Pod'akovanie: Práca bola realizovaná vďaka podpore grantu KEGA 002UK-4/2016.

7P06

STANOVENIE SAMÁRIA-151 METÓDOU EXTRAČNEJ CHROMATOGRAFIE

Jana Strišovská¹, Dušan Galanda¹, Dominika Tatárová¹

¹ *Katedra jadrovej chémie, Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského, Mlynská dolina CH-I, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovenská republika
jana.strisovska@uniba.sk*

Dlhožijúci izotop vzácnych zemín ^{151}Sm ($T_{1/2} = 90$ rokov) je beta-emitujúci nuklid, ktorý sa v prostredí vyskytuje ako dôsledok jadrového testovania v atmosfére ale hlavne ako produkt z činností jadrových zariadení. V jadrových reaktoroch sa ^{151}Sm vzniká štiepením počas ožarovania uránových palivových tyčí. Primárne sa premieňa na takmer stabilný izotop ^{151}Eu beta premenou (99,09 %).

Táto štúdia prezentuje modifikovanú chromatografickú separačnú techniku na stanovenie samária vo vzorkách rádioaktívnych odpadov. Samárium sa separuje sekvenčne na dvoch extrakčných chromatografických materiáloch - sorbent DGA resin typu Branched a Ln resin. Navrhovaná metóda zahŕňa chromatografickú separáciu Sm z matricových prvkov a stanovenie Sm pomocou kvapalinovej scintilačnej spektrometrie. Schéma separácie bola študovaná s cieľom odstrániť interferujúce prvky zo vzorky betónu (X08160, National Physical Laboratory).

Sorbent DGA resin bol použitý nielen na zakoncentrovanie Sm, ale aj interferujúci Eu, keďže vykazuje extrémne vysokú afinitu pre lantanoidy a aktinoidy v oxidačnom stupni III v prostredí kyseliny dusičnej. Z tohto dôvodu je nevyhnutná aplikácia Ln resinu na selektívnu separáciu Sm. Po separácii bola prítomnosť Eu sledovaná gamaspektrometricky (detektor HPGe). Na stanovenie výťažku samária sa použil izotop s dlhou dobou polpremeny ^{147}Sm ($T_{1/2} = 1,06 \cdot 10^{11}$ rokov). Hodnota aktivity ^{151}Sm bola stanovená kvapalinovou scintilačnou spektrometriou (Tri-Carb 3300 Liquid Scintillation Counter, Canberra).

7P07

SLEDOVÁNÍ VYBRANÝCH PARAMETRŮ PŘI OZAŘOVÁNÍ BUNĚK IONIZUJÍCÍM ZÁŘENÍMLukáš Ondrák¹, Viliam Múčka¹

¹ČVUT v Praze, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, Katedra jaderné chemie, Břehová 7, 115 19 Praha
ondrak.lukas@gmail.com

Vliv ionizujícího záření na živé buňky lze ovlivnit mnoha parametry, mezi které patří mimo jiné i dávkový příkon ionizujícího záření nebo přítomnost různých modifikátorů (radiosenzibilizátory nebo radioprotektory [1]).

Jedním z cílů této práce bylo prostudovat vliv dimethylsulfoxidu jako vychytávače hydroxylových radikálů na radiační citlivost kvasinek *Saccharomyces cerevisiae*, DBM 272 při ozařování zářením gama ⁶⁰Co.

Aplikované dávkové rychlosti, resp. dávky gama záření byly 25,4-40,0 Gy/h, resp. 75-450 Gy. Radiační ochrana σ byla definována jako podíl přirozených logaritmu frakcí přeživších buněk bez vychytávače s_0 a s vychytávačem s . Míra radiační ochrany k , t. j. radiační ochrana založená na vychytávání hydroxylových radikálů, byla definována jako směrnice závislosti radiační ochrany σ na vychytávací účinnosti Q dimethylsulfoxidu definované jako součin koncentrace c dimethylsulfoxidu v ozařované suspenzi a rychlostní konstanty k_{OH} reakce dimethylsulfoxidu s hydroxylovými radikály.

Bylo zjištěno, že jak radiační ochrana σ , tak míra radiační ochrany k je lineárně rostoucí funkcí dávkové rychlosti gama záření. Dále bylo zjištěno, že žádná z těchto veličin nezávisí na dávce záření gama.

Tato práce vznikla v rámci projektu SGS17/195/OHK4/3T/14.

[1] Viliam Múčka, Pavel Bláha, Václav Čuba, Jaroslav Červenák: Int. J. Radiat. Biol., 89, 1045, (2013).

7P08

FYKOREMEDIÁCIA AKO POTENCIÁLNA METÓDA DEKONTAMINÁCIE VÔD

Dominika Tatarová, Dušan Galanda, Jozef Kuruc

Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra jadrovej chémie, Ilkovičova 6, 84215 Bratislava, Slovenská republika
tatarova.d@gmail.com

Fykoremediácia, resp. bioremediácia kontaminovaného prostredia pomocou mikrorias, predstavuje šetrnú sanačnú techniku znečistených vôd. Výhoda použitia mikrorias spočíva v ich nízkych nárokoch na živiny (N, P, C) [1] a rast, jednoduchej kultivácii v laboratórnych podmienkach, ako aj rýchlemu nárastu biomasy. V súčasnosti sa mikroriasy používajú najmä na dekontamináciu ťažkých kovov, rôznych organických rozpúšťadiel, pesticídov a mnoho ďalších [2].

V experimentoch sme sa zamerali na stanovenie fykoremediačného potenciálu mikrorias *Chlamydomonas reinhardtii* a *Scenedesmus obliquus* v cielene kontaminovaných vodných roztokoch obsahujúcich rádioizotopy ¹³⁷Cs a ⁶⁰Co. Mikroriasy boli vybrané na základe ich vysokej schopnosti bioremediácie prostredia. Fykoremediačný potenciál sa stanovoval sledovaním vplyvu rôznych hodnôt pH prostredia v rozmedzí od pH 2 do pH 9 ako aj sledovaním poklesu aktivity roztoku v čase. Kultivácia mikrorias prebiehala v svetelnom režime 12h/12h svetlo/tma pri modrom a červenom svetle, ktoré podporuje rast rastlín, pri laboratórnej teplote. Vzhľadom na stanovenie sorpčnej kapacity mikrorias bola použitá metóda na stanovenie koncentrácie mikrorias pomocou Bürkerovej komôrky paralelne so spektrofotometrickou metódou.

Táto práca bola podporená Grantom Univerzity Komenského UK/408/2017.

- [1] Abdel-Raouf N, Al-Homaidan A. A, Ibraheem I. B. (2012): Microalgae and wastewater treatment. *Saudi J BiolSci* 19; s. 257-275.
- [2] Soudek P., Petrová Š., Benešová D., Kotyza J. a Vaněk T. (2008): Fytoremediace a možnosti zvýšení jejich účinnosti. *Chem listy* 102; s. 346-352.

7P09

HIGH-ENERGY CHEMISTRY - INTERDISCIPLINARY SCIENCE. PRESENT STATE AND PERSPECTIVES OF DEVELOPMENT IN THE SLOVAK REPUBLIC AND THE CZECH REPUBLIC

Jozef Kuruc

*Department of Nuclear Chemistry, Faculty of Natural
Sciences, Comenius University, Ilkovicova 6, 842 15
Bratislava, Slovak Republic
jozef.kuruc@uniba.sk*

The paper describes the concepts of a new chemical science – High-Energy Chemistry (HECH) [1-3]. Under this concept, the field of science has been associated with chemical processes initiated by non-thermal energy carriers - ionizing radiation, light, electric, sound field etc. The common feature of HECH is the formation of ions and excited states at temperatures from the ambient temperature at which these particles cannot be generated due to equilibrium processes. The non-thermal energy carriers and chemical sciences are systematized that have been created by examining the impact of these energy carriers on substances. There are two groups of energy carriers: those that transmit an interaction energy substantially higher than kT (ionizing radiation, light, etc.) in one act, and those that transmit the energy of interaction is higher than kT in a single act but the flux of these energy carriers is so high that in this field, the formation of ions and electron-excited states and free radicals are observed. HECH processes consist of three

stages: 1) Interaction of energy carriers with the substance in times of femtoseconds with the formation of primary intermediates; 2) Conversion of primary intermediates proceed in times of picoseconds to nanoseconds to secondary and tertiary intermediates ("hot spots") because the energy distribution in the medium is inhomogeneous; intermediates unusual for thermal chemistry play an important role at this stage; 3) Chemical stage that takes place over a time exceeding the microsecond, excited states, ions, and radicals, also common for thermal chemistry are involved. In contrast with thermal reactions, the concentration of intermediates of many orders exceeds equilibrium in terms of Maxwell-Boltzmann distribution. The individual problems of HECH, including the current state in the world and experimental equipment in the Slovak Republic and the Czech Republic, are discussed.

- [1] Bugaenko L. T., Kuzmin M. G., Polak L. S. *Chimija vysokich energij*, Chimija, Moskva, 1988. ISBN-10: 5-7245-0101-5; Bugaenko L. T., Kuzmin M. G., Polak L. S. *High-Energy Chemistry*, Ellis Horwood, New York, 1992. ISBN 0133886468.
- [2] *Eksperimental'nyje metody chimii vysokich energij*. Red. M. Ja. Mel'nikov. Moskva, Izd-vo Mosk. gos. univ., 2009. ISBN 978-5-211-05561-2.
- [3] Kuruc, J. *Chémia vysokých energií*. 1. Díl. *Fotochémia, plazmochémia, sonochémia*. Omega Info, Bratislava, 2011. ISBN: 978-80-89337-07-1.

PREDNÁŠKY - SEKCIA 8 VYUČOVANIE A HISTÓRIA CHÉMIE

8P01

MIKROEXPERIMENTY PRO PŘEDNÁŠKY

Vilém Bartůněk¹, Ondřej Jankovský¹, David
Sedmidubský¹

¹*Vysoká škola chemicko-technologická v Praze,
Technická 5, 166 28 Praha 6 – Dejvice,
vilem.bartunek@vscht.cz*

Vývoj optických systémů v současné době umožňuje přenos děje sledovaného optickým

mikroskopem přes optický kabel do notebooku nebo stolního počítače a jeho další přenášení na plátno. V příspěvku uvádíme sadu experimentů, při kterých je detail mikroexperimentu převáděn na plátno v reálném čase – studenti tak budou moci sledovat přesný průběh pokusu. Velkou výhodou bude malé množství použitých chemikálií, které budou předem připraveny ve formě experimentální sady. Vyučující pak bude pouze postupovat podle návodu, nebude muset nic předem připravovat. Bezprostřednost předváděných pokusů včetně odchylek má neporovnatelně větší účinek než pouhé přehrávání video-experimentů. Je zřejmé, že studenti ocení praktické ukázky během teoretických přednášek i cvičení. Stejně tak studenti ocení i možnost zaslání výsledku experimentu po přednáškové místnosti.

Tento výsledok byl podpořen grantem PIGA, číslo C1_VSCHT_2017_017

8P02

OBSAH VÝUKY CHEMIE NA ÚROVNI ISCED 2 & 3 VE 21. STOLETÍ

Hana Čtrnáctová¹, Mária Ganajová²

¹*Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy, Albertov 6, 128 43 Praha 2*

²*Přírodovědecká fakulta Univerzity P. J. Šafárika, Moyzesova 11, 040 01 Košice*
ctr@natur.cuni.cz, maria.ganajova@upjs.sk

Obsah učiva na úrovni ISCED 2 a 3, tj. nižší a vyšší sekundární vzdělávání v současnosti vymezují v ČR rámcové vzdělávací programy a v SR státní vzdělávací programy. Charakteristika obsahu učiva je však v těchto programech velice stručná a neodráží tak současné požadavky na toto učivo. Obsah vzdělávání v 21. století by vedle jádra základních poznatků, měla tvořit témata 21. století, dovednosti pro učení jako je kritické myšlení, řešení problémů, komunikace, spolupráce, dovednosti pro život jako je zodpovědnost, samostatnost, flexibilita a dovednosti související s využíváním ICT [1].

Jádro základních poznatků v obsahu učiva chemie tvoří poznatky o složení a vlastnostech látek, o jejich chemických přeměnách a jejich využití v praxi z hlediska významu pro člověka, vlivu na životní prostředí a lidské zdraví.

Obsah vzdělávání ve 21. století však musí zahrnovat i interdisciplinární témata, která souvisejí s rozvojem občanské, zdravotní, finanční, vědecké, ekologické gramotnosti a globální povědomím [2]. Aktuální témata pro chemii 21. století, které se vztahují k řešení nejkritičtějších problémů, kterým čelí lidstvo jsou klimatické změny, kvalita vody, zdroje energie, potravinářská výroba, zdraví a nemoci a udržitelnost životního prostředí [3]. Jejich cílem je učit chemii pomocí reálných situací ze života a využít přitom přirozený zájem žáků o dění okolo nás.

Poděkování: Článek vznikl za finanční podpory projektu PROGRES Q46 Univerzity Karlovy.

- [1] Mária Ganajová, Ivana Sotáková: Ako naplňovať požiadavky pre výučbu chémie v 21. storočí. *Chemické listy* (2017)(v tlači).
- [2] Partnership for 21st Century Skills: *21st Century Skills Assessment*. 2007 [online]. [cit. 2016-06-20] Dostupné z: http://www.p21.org/storage/documents/21st_Cent

[ury_Skills_Assessment_e-paper.pdf](#)

- [5] The Millennium Development Goals: *Report 2010* [online]. [cit. 2016-06-20] Dostupné z: <http://www.un.org/millenniumgoals/pdf/MDG%20Report%202010%20En%20r15%20low%20res%2020100615%20-.pdf>

8P03

CHEMICKÉ UČEBNÉ ÚLOHY PRE ROZVOJ SPÔSOBILOSTÍ ŽIAKOV

Mária Ganajová¹, Hana Čtrnáctová², Ivana Sotáková¹,
Mária Siváková³

¹*Oddelenie didaktiky chémie, Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Přírodovědecká fakulta, Moyzesova 11, 040 01 Košice, maria.ganajova@upjs.sk*

²*Katedra učitelství a didaktiky chemie, Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Albertov 3, 128 43 Praha 2, hana.ctrnactova@natur.cuni.cz*

³*Štátny pedagogický ústav, Pluhová 8, 830 00 Bratislava, maria.sivakova@statpedu.sk*

Príspevok informuje o vytvorenej monografii *Rozvoj zručností 21. storočia prostredníctvom učebných úloh z chémie* [1]. Úlohy v monografii boli navrhnuté v rámci riešenia projektu Štátneho pedagogického ústavu v Bratislave pod názvom *Tvorba a overovanie úloh na kompetenčnom základe v predmete chémie* (2014-2016). Úlohy zamerané na jednu komplexnú tému sú tvorené čiastkovými (obvykle problémovými) úlohami, ktoré sa vzťahujú k rôznym aspektom témy. Vyžadujú spôsobilosti používať vedomosti a zručnosti, ako sú vedieť tvoriť hypotézy, experimentovať, argumentovať, diskutovať, tvoriť závery apod.

Možno ich použiť vo fixačnej i diagnostickej fáze vyučovacieho procesu. Očakávame ich prínos pre žiakov základných škôl z hľadiska zlepšenia prípravy na merania OECD PISA. Na gymnáziu môžu byť nápomocné pri príprave maturitných zadani úloh najvyššej úrovne – úlohy zamerané na čitateľskú alebo prírodovednú gramotnosť, úlohy prepájajúce viaceré tematické okruhy a skúsenosti z bežného života [2, 3]. V oboch stupňoch vzdelávania riešenie úloh podporí rozvoj zručností potrebných na získanie spôsobilostí pre prácu a ďalšie vzdelávanie.

Ich implementácia do výučby však vyžaduje zmenu prístupu učiteľov vzhľadom k využívaniu koncepcií zameraných na aktívne učenie sa žiakov, ako sú bádateľsky orientovaná výučba, projektové vyučovanie, počítačom podporované experimenty apod., pretože tieto koncepcie umožňujú rozvoj požadovaných zručností

a komplexné úlohy umožňujú tieto zručnosti overiť a následne ich rozvíjať.

- [1] Mária Siváková, Mária Ganajová, Hana Čtrnáctová, Ivana Sotáková: Rozvoj zručností 21. storočia prostredníctvom učebných úloh z chémie. Bratislava: ŠPÚ, (2016) (v tlači).
- [2] Mária Ganajová: Metodika tvorby učebných úloh a didaktických testov pre chémiu. Košice: UPJŠ, (2015).
- [3] Hana Čtrnáctová: Učebné úlohy v chemii. I. díl. Praha: Karolinum, (2009).

8P04

POTRAVINY POHLEDEM CHEMIKA – KURZ PRO POSLUCHAČE UNIVERZITY TŘETÍHO VĚKU

Jana Prášilová¹

¹*Katedra chemie Přírodovědecké fakulty Ostravské univerzity, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava, jana.prasilova@osu.cz*

Pro aktivní seniory, kteří mají chuť se sebevzdělávat, setkávat se se svými vrstevníky, zapojit se do přírodovědných aktivit a neztrácejí zájem o nové poznatky, je každý rok otevřena Virtuální univerzita třetího věku při Ostravské univerzitě. Kurzy zajišťují akademičtí pracovníci a jsou vedeny v prezenční, distanční i kombinované formě [1].

Velkým a milým překvapením byl zájem seniorů o kurz z oblasti chemie. V letním semestru akademického roku 2016/2017 byl proto pro studenty U3V otevřen kurz „Potraviny pohledem chemika“. Během semestru absolvovali účastníci tři přednášky a dvě praktická cvičení. Tematicky byl kurz zaměřen na výrobu piva, cukru a mléčných výrobků [2]. Videozáznamy přednášek, podklady, ale také úkoly a testy měli senioři k dispozici na platformě Moodle. Většina z nich se i přes svůj věk ve virtuálním prostředí naučila dobře orientovat.

Děkuji všem svým posluchačům Virtuální univerzity třetího věku kurzu „Potraviny pohledem chemika“ za spolupráci a vzorné plnění zadaných úkolů.

- [1] Virtuální univerzita třetího věku. <https://setip.osu.cz/>
- [2] Prášilová, J., Kameníček, J. Vybrané kapitoly z průmyslové chemie. 1. vyd. Olomouc: Univerzita Palackého v Olomouci, 2013. Skripta. ISBN 978-80-244-3976-1

8P05

HODINY CHÉMIE AKO MIESTO BOJA PROTI KONŠPIRÁCIÁM A HOAXOM

Ján Reguli

Katedra chémie, Pedagogická fakulta Trnavskej univerzity v Trnave. Priemyselná 4, 918 43 Trnava jan.reguli@truni.sk

Cieľom výchovy a vzdelávania nie je len odovzdávanie poznatkov, ale aj rozvíjanie schopnosti kriticky posudzovať prijímané informácie a rozhodovať sa v súlade s vedeckými predstavami.

Dostupnosť internetu žiaľ znamená aj šírenie ľubovoľných názorov bez ohľadu na ich pravdivosť alebo súlad s vedeckým poznáním.

Mnoho konšpiračných teórií sa týka dejov v prírode alebo v spoločnosti, ktoré majú prírodovednú podstatu a často sa týkajú fyzikálnych zákonitostí alebo chemických vlastností látok. Toto nám umožňuje označiť aj všeobecne šírené informácie o nebezpečnosti a škodlivosti všetkých syntetických „chemických látok“ za hoaxy a konšpiračné teórie. Po každom „obvinení“ zo šírenia vedecky neakceptovateľných predstáv musí samozrejme nasledovať zrozumiteľné a správne vysvetlenie daného deja alebo vlastnosti.

Viaceré z týchto teórií môžu predstavovať reálne ohrozenie zdravia alebo života ľudí, ktorí im uveria. Tými, ktoré majú chemickú podstatu, by sa mali zaoberať učitelia chémie. Niektoré názory rôznych skupín verejnosti majú kontroverznú povahu, často preto, že rôzne skupiny verejnosti sa na danú problematiku dívajú len zo svojho hľadiska. Týmito témami mala zaoberať alternatívna stredoškolská chémia [1, 2], ktorú navrhujeme najmä pre humanitne, resp. nechemicky zamerané študijné programy na stredných školách.

V prednáške si predstavíme viaceré konšpiračné teórie súvisiace s chémiou. Napríklad „chemtrails“, odmietanie očkovania, alternatívna medicína, nebezpečenstvo glutamanu a ďalších preverených potravinárskych aditív a mnohé ďalšie.

*Príspevok bol pripravený v rámci riešenia a vďaka podpore grantu KEGA 003TTU-4/2016 **Chémia a spoločnosť**: Návrh alternatívneho obsahu stredoškolskej chémie a tvorba učebnice pre zvýšenie chemickej gramotnosti študentov a lepší vzťah verejnosti k chémii.*

- [1] Reguli, J.: Controversial Socio-scientific Issues in Chemistry Teachers' Education. *Proceedings of the 7th International Conference on Research in Didactics of the Sciences, DidSci 2016*, Pedagogical University, Kraków, Poland, June 29th – July 1st, 2016, str.130 – 133. ISBN 978-83-8084-037-9.
- [2] Reguli, J. Stačí jedna stredoškolská chémia? *Výzkum, teorie a praxe v didaktice chemie*, XXIII. Mezinárodní konference o výuce chemie, Hradec Králové, 15. - 17. 9. 2014, str. 95-102.

8P06

PODPORA PŘÍRODOVĚDNÉHO VZDĚLÁVÁNÍ NA KATEDŘE CHEMIE FPE ZČU

Jitka Štrofová¹, Vladimír Sirotek¹

¹Katedra chemie, Fakulta pedagogická, Západočeská univerzita v Plzni, Veleslavínova 42, 306 14 Plzeň
strofova@kch.zcu.cz

Hlavním úkolem Fakulty pedagogické ZČU je pregraduální příprava budoucích učitelů, a to včetně učitelů chemie. Kromě toho fakulta hraje významnou roli v oblasti dalšího vzdělávání pedagogů a nezanedbatelná je také její podpora přírodovědného vzdělávání v regionu. Tato podpora se uskutečňuje především prostřednictvím projektů, na jejichž řešení se v minulých letech podílela a v současnosti podílí katedra chemie.

V příspěvku budou stručně charakterizovány aktivity na podporu přírodovědného vzdělávání, do nichž se naše katedra zapojila.

Tyto aktivity směřují do 3 oblastí:

- popularizace chemie a prezentace činnosti katedry široké veřejnosti (Dny vědy a techniky, Noc vědců)
- zvýšení zájmu žáků ZŠ a SŠ o studium chemie (např. Enviroexperiment, Praktická výuka biologie, fyziky a chemie) [1, 2]
- práce s nadanými žáky (Chemický kemp, Talent)

V současné době je naše pozornost soustředěna především na dva projekty. Tím prvním je projekt pro nadané žáky v Plzeňském a Karlovarském kraji, kterým nabízíme cyklus přednášek, workshopů a exkurzí z biologie, fyziky a chemie. Druhým je projekt Didaktika – Člověk a příroda A [3], jehož hlavním cílem je zvýšení kompetencí učitelů ZŠ ve vzdělávací oblasti Člověk a příroda prostřednictvím oborového a regionálního společenství praxe.

Bližší informace o výše zmíněných aktivitách lze získat na webových stránkách katedry chemie (www.fpe.zcu.cz/kch).

Příspěvek vznikl díky podpoře projektu Didaktika - Člověk a příroda A (CZ.02.3.68/0.0/0.0/16_011/0000665).

- [1] Enviroexperiment. *Enviroexperiment* [online]. [cit. 13.06.2017]. Dostupné z: <http://www.enviroexperiment.cz/>
- [2] Praktická výuka BFCH. *Projektové centrum* [online]. [cit. 13.06.2017]. Dostupné z: <https://www.pc.fpe.zcu.cz/?cat=36>
- [3] Didaktika – Člověk a příroda A. *Projektové centrum* [online]. [cit. 13.06.2017]. Dostupné z: <https://www.pc.fpe.zcu.cz/?p=2084>

8P07

SPOMIENKA NA PROFESORA MIKULÁŠA FURDÍKA (1905 – 1967)

Ján Čaplovič

ing.jan.caplovic@hotmail.com

Pred polstoročím, 29. apríla 1967, zomrel po dlhej ťažkej chorobe profesor organickej chémie na Prírodovedeckej fakulte Univerzity Komenského ing. Mikuláš Furdík. Na fakulte, kde založil katedru organickej chémie a biochémie, pôsobil od roku 1955.

Pred príchodom na univerzitu pracoval takmer 10 rokov od skončenia vojny v starom bratislavskom chemickom podniku Dynamit Nobel, kde ako technický riaditeľ založil podnikový výskumný ústav. Medzi jeho prvých vedúcich pracovníkov patrilo niekoľko bývalých zamestnancov výskumného pracoviska firmy Baťa v Zlíne, ktorých M. Furdík poznal z čias svojho tamjšieho pôsobenia v rokoch 1935 – 1943. Výskumný ústav Dynamit Nobel po organizačnom oddelení od závodu pod vedením M. Furdíka bol podriadený oblastnému riaditeľstvu Chemických závodov na Slovensku (krátky čas ako Výskumný ústav technickej chémie) a po zriadení ministerstva chemického priemyslu sa stal Výskumným ústavom agrochemickej technológie ako rezortný ústav zameraný na výživu a ochranu rastlín.

Autor (jeden z mála žijúcich pamätníkov) prezentuje niekoľko osobných spomienok na toto obdobie a uvádza na správnu mieru niektoré nepresnosti v literatúre.

8P08

HISTÓRIA POTRAVINÁRSKEHO PRIEMYSLU NA SLOVENSKU

Michal Uher¹, Ľudovít Hallon², Kamil Cejpek³,
Viktor Milata¹

¹Oddelenie organickej chémie, Ústav organickej chémie, katalýzy a petrochémie FCHPT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
viktor.milata@stuba.sk

²Historický ústav SAV, Klemensova ul. 19, 814 99 Bratislava

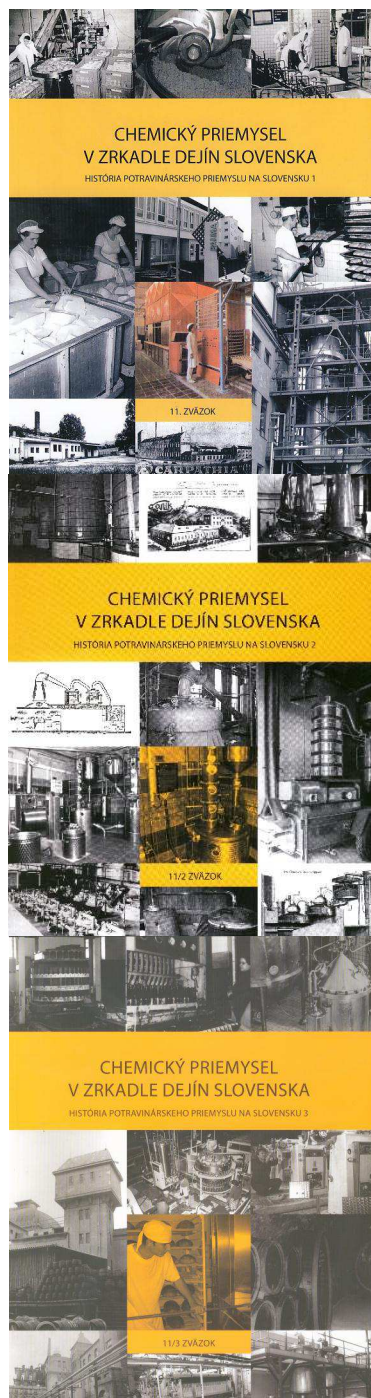
³Dom techniky ZSVTS Bratislava, Kocelova 15, Bratislava

Výroba potravín sa na prelome 19. a 20. storočia stáva priemyselným odvetvím. Priemyselná revolúcia zdokonalila potravinársku technológiu a narastajúci dopyt zvýšil efektivitu výroby. Podniky začali postupne zavádzať nové strojové zariadenia a zdokonaľovať technológie. Produkcia potravín narastla.

V prednáške predstavíme ďalší diel zo série monografií „Chemický priemysel v zrkadle dejín Slovenska“. Zväzok č. 11 je venovaný potravinárskemu priemyslu, ktorý môžeme v súčasnosti definovať ako odvetvie zaoberajúce sa výrobou alebo spracovaním potravín, ako aj niektorých predmetov bežnej spotreby a tiež surovín a polotovarov pre iné priemyselné odvetvia.

Z dôvodu mimoriadnej obšírnosti spracovania potravinárskeho priemyslu bol 11. zväzok rozdelený na tri časti:

1. časť: Mlieko, cereálie, mäso, konzervárstvo, tuky a kozmetika, Bratislava 2013, 166 strán,
2. časť: Liehovarníctvo, Bratislava 2015, 278 strán,
3. časť: Cukor, škrob, pivo a slad, vinárstvo, minerálne vody, soľ, tabak, obaly, výchova pracovníkov pre potravinársky priemysel, kontrola kvality potravín, Výskumný ústav potravinársky, potravinárstvo v projekcii a strojárstvo, Bratislava 2016, 218 strán.



V prvom dieli sú spracované tieto výrobné odbory: mliekárstvo, priemysel cereálií, mäsový priemysel, konzervársky priemysel a tukový priemysel.

Druhý diel je venovaný histórii výroby liehu na Slovensku. Ing. Forsthofer okrem súhrnu zachovaných faktov sa snažil ich hodnotiť v spektre hospodárskej, agropriemyselnej i vzdelanostnej rozvinutosti nášho územia v jednotlivých obdobiach.

Tretí diel je venovaný ostatným odvetviam potravinárskeho priemyslu a to cukrovarníctvo, škrobárstvo, výroba piba, vína, minerálnym

vodám, soli a tabaku. Snažili sme sa tiež opísať obaly a obalovú techniku, ktorá má v modernom potravinárskom priemysle nezastupiteľné miesto. V samostatnej kapitole sme sa venovali problematike prípravy stredoškolsky a vysokoškolsky vzdelaných odborníkov. Získané písomné a obrazové materiály sme sa snažili spracovať tak, aby sa pripomenuli historické korene potravinárskeho priemyslu a čo najvernejšie opísali najmä obdobie uplynulého polstoročia v tomto odvetví.

Práca bola podporená grantom MŠ SR agentúry VEGA č. 2/0042/16 a KEGA č. 034STU-4/2017.

Literatúra.

Chemický priemysel v zrkadle dejín Slovenska: História potravinárskeho priemyslu na Slovensku. 11. zväzok, 1. diel, Nakladateľstvo STU, Bratislava 2013, 166 s, 250 výtlačkov, ISBN 978-80-227-4088-3; 2. diel, Nakladateľstvo STU, Bratislava 2015, 277 s, 500 výtlačkov, ISBN 978-80-227-4412-6; 3. diel, Vydavateľstvo STU, Bratislava 2016, 218 s, 250 výtlačkov, ISBN 978-80-227-4549-9.

PREDNÁŠKY - SEKCIA 9 ŽIVOTNÉ PROSTREDIE, POTRAVINÁRSTVO A BIOTECHNOLÓGIE

9P01

FAJČÍŠ, PIJEŠ, DROGUJEŠ? ČO VIEME ZISTIŤ O VÁS Z ODPADOVÝCH VÔD

Igor Bodík¹, Tomáš Mackuľák¹,

¹Odd. environmentálneho inžinierstva FCHPT STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 15 Bratislava, igor.bodik@stuba.sk

Jednou z najsledovanejších skupín nových polutantov sú lieky, resp. farmaceutické prípravky vo všeobecnosti. Na rozdiel od priemyselných polutantov, ktorých výrobu a prípadnú kontamináciu v životnom prostredí možno legislatívne čiastočne obmedziť alebo aj zakázať (DDT), pri farmaceutických prípravkoch toto obmedzenie pravdepodobne nebude možné, lebo vo väčšine prípadoch ide o látky, ktoré pozitívne pôsobia na zdravie človeka a teda nemožno zabrániť ich používaniu a ich následnému výskytu v odpadových vodách.

Cieľom tohto príspevku je prezentovať výsledky 4-ročného projektu zameraného na monitoring liekov a drog v odpadových vodách Slovenska. Spolu 22 najväčších slovenských ČOV s počtom pripojených obyvateľov vyše 1,4 mil. bolo dlhodobo monitorovaných na prítomnosť asi 30 psychoaktívnych látok (legálnych aj nelegálnych drog, vrátane alkoholu, kofeinu a nikotínu) a asi 90 liečiv z rôznych terapeutických skupín.

Výsledky projektu poukázali na to, že v odpadových vodách sa náchádza široká paleta liečiv a ich metabolitov, pričom dominujú predovšetkým antibiotiká, psychostimulanty a kardiovaskulárne lieky. Z nelegálnych drog dominujú predovšetkým metamfetamín (pervitín) a THC (marihuana). Prínosom takéhoto monitoringu je aj možnosť porovnávať spotreby liekov a drog medzi jednotlivými mestami, sledovať časové trendy a pod. Otvára sa však aj otázka prieniku týchto látok do povrchových a pitných vôd.

Táto práca bola podporená Slovenskou agentúrou pre výskum a rozvoj v rámci zmluvy č. APVV-0122-12

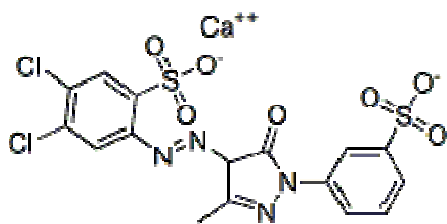
9P02

ČIŠTĚNÍ ODPADNÍCH VOD Z VÝROBY PIGMENTU YELLOW 183

Libor Dušek¹, Tomáš Weidlich¹

¹Univerzita Pardubice, Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Fakulta chemicko-technologická, Studentská 95, 53210 Pardubice libor.dusek@upce.cz

Práce je zaměřena na čištění odpadních a procesních vod z výroby monoazopigmentového vápenatého laku Pigment Yellow 183 (C.I. 1879), CAS [65212-77-3], jež obsahují mimo jiné jeho ve vodě rozpustnou sodnou sůl [1-3]. Současná předúprava odpadní vody je založená na sorpci P.Y.183 Na⁺ na aktivním uhlí Silcarbon.



Pigment Yellow 183

Experimentálna časť práce je venovaná modifikácii náplne pôsobením kapalného iontoměnič zajišťujúci zvýšenie účinnosti zachytu na regenerovanom pevném sorbentu. Jako kapalným iontoměnič byl použit vodný roztok hexadecyltrimethylammonium bromidu o koncentraci $3,5 \cdot 10^{-2} \text{ mol l}^{-1}$ a ARQUAD 2HT (85% dimethyldioctadecylammonium chlorid) o koncentraci $2,5 \cdot 10^{-2} \text{ mol l}^{-1}$, respektive jejich směsi. Současně byla s využitím UV-VIS spektroskopie sledována koncentrace P.Y.183 Na^+ a pokles parametru AOX a posuzována tak účinnost modifikovaného pevného sorbentu oproti stavu před úpravou pomocí kapalného iontoměnič.

Práce vznikla za finanční podpory TAČR (projekt TH02030200).

- [1] L. Dušek. *Organické pigmenty*. Pardubice: Univerzita Pardubice, 2004. 240 s. ISBN 80-7194-635-4.
- [2] CIBA GEIGY CORP. *Mixed sodium, ammonium and/or calcium salt crystals of laked monoazo disulfonated pyrazolone pigments*. Inventors: Stefan Hari, Arnold Grubenmann, Andreas Burkhard. US4980458 (A)-1990-12-25.
- [3] S. Ivashevskaya, J. van de Streek, J. Djanhan, E. Alig, J. Bruning, M. Bolte, M. Schmidt, P. Blaschka, H. Hoffken, P. Erk: *Structural science* (2009), 65, 212-22.

9P03

RADIKÁLY V KATALÝZE RESPIRAČNÝCH OXIDÁZ

Katarina Kopčová¹, Daniel Jancura^{1,2}, Marián Fabián²

¹Katedra Biofyziky, Univerzita P. J. Šafárika, Jesenná 5, 04001 Košice

²Centrum Interdisciplinárnych Biovied, Univerzita P. J. Šafárika, Jesenná 5, 04001 Košice

U aeróbných organizmov respiračné oxidázy katalyzujú redukciu molekulového kyslíka na vodu. Redukcia sa uskutočňuje postupným prenosom štyroch elektrónov na naviazaný kyslík v katalytickom centre enzýmu. Enzým je však schopný spustiť reakciu s O_2 len vtedy, keď je redukovaný dvomi elektrónami. Tento prvý

intermediát (**P**, peroxy forma) odpovedá vzniku peroxidu v katalytickom centre. Počiatočné štúdie zistili, že táto reakcia neuvolňuje peroxid do vonkajšieho prostredia. Neskôr sa ukázalo, že **P** stav je v skutočnosti výsledkom redukcie O_2 štyrmi elektrónami [1]. Dva elektróny sú získané od externých donorov a dva poskytuje 'interne' samotný enzým. Za zdroj jedného interného elektrónu sa považujú aromatické aminokyseliny (Tyr, Trp), ktoré sú umiestnené v blízkosti katalytického centra. Doposiaľ však oxidácia aromatickej aminokyseliny, vznik radikálu v **P** forme, nebola experimentálne potvrdená. My sme na izolovanej respiračnej cytochróm c oxidáze z hovädzieho srdca pozorovali za určitých podmienok vznik voľného radikálu v **P** stave pomocou elektrón paramagnetickej spektroskopie. Radikál nie je stabilný a migruje z katalytického centra do vonkajšieho prostredia.

Podakovanie: Práca bola podporená Slovenským ministerstvom školstva (APVV-15-0485) a projektom FP7 EU - CELIM (316310).

- [4] Proshlyakov, D. A., Pressler, M. A., DeMaso, C., Leykam, J. F., DeWitt, D. L., and Babcock, G. T. (2000) Oxygen activation and reduction in respiration: involvement of redox-active tyrosine 244, *Science* 290, 1588-1591.

9P04

ENZÝMOVÁ PRÍPRAVA PRÍRODNÝCH FENYLETANOIDNÝCH GLYKOZIDOV A ICH ANALÓGOV

Elena Karnišová Potocká¹, Mária Mastihubová¹, Peter Kis¹, Vladimír Mastihuba¹

¹Laboratórium biokatalýzy a organickej syntézy, Chemický ústav SAV, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava

vladimir.mastihuba@savba.sk

Tyrozol a hydroxytyrozol patria k najsilnejším prírodným antioxidantom. Ich glykozidy, samy osebe bioaktívne zlúčeniny, sú základným štruktúrnym fragmentom celej skupiny rastlinných metabolitov so širokou škálou biologických aktivít. V príspevku prezentujeme enzýmovú prípravu salidrozidu (tyrozol β -D-galaktopyranozidu) a jeho glykozidových analógov s využitím komerčných zdrojov glykozidáz. Okrem salidrozidu boli po optimalizácii reakčných podmienok pripravené tyrozol α -D-galaktopyranozid, tyrozol- β -D-galaktopyranozid, β -D-fruktofuranozidy tyrozolu a hydroxytyrozolu a tyrozol rutinozid. Glykozylácie boli uskutočnené procesom

transglykozylácie vychádzajúce z príslušných disacharidov (celobióza, laktóza, melibióza, sacharóza), prípadne z rutínu. Reakcie boli katalyzované komerčnými glykozidázami, v prípade transrutinozylácie boli použité sušené kvetné puky sofory japonskej. Glykozylácie prebiehali selektívne len na primárnom hydroxyle tyrozolu a hydroxytyrozolu, výťažky purifikovaných produktov sa pohybovali v rozpätí 7-32 %.

Táto práca vznikla vďaka podpore Agentúry na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APVV-0846-12 a podpore agentúry VEGA grantom č. 2/0157/16.

9P05 VYUŽITIE MIKROORGANIZMOV PRI ODBÚRAVANÍ TYRAMÍNU V MODELOVÝCH PODMIENKACH

Patrik Body, Gabriel Greif, Denisa Škodáčková,
Dominika Horná, Mária Greifová

*Ústav potravinárstva a výživy, Fakulta chemickej
a potravinárskej technológie – STU, Radlinského 9,
812 37 Bratislava
patrik.body@stuba.sk*

Mliečne výrobky, ryby a fermentované potraviny sa často spájajú s potravinovým intoxikáciami spôsobenými prítomnými toxínmi mikrobiálneho pôvodu, ako sú bakteriálne exotoxíny, plesňové mykotoxíny a biogénne amíny. Biogénne amíny (BA) predstavujú štruktúrne heterogénnu skupinu biologicky aktívnych dusíkatých zlúčenín s nízkou molekulovou hmotnosťou, ktoré vznikajú pri dekarboxylácii voľných aminokyselín v rastlinách, zvieratách a človeku. V poslednom období sa venuje pozornosť mikroorganizmom, ktoré sú schopné tieto amíny odbúravať. Cieľom tejto práce bolo otestovať schopnosť 15 rôznych kmeňov laktobacilov, 6 rôznych kmeňov *Pediococcus pentosaceus* a 3 kmene *Geotrichum candidum* znižovať koncentráciu tyramínu v modelových podmienkach v MRS bujóne, v acetátovom a fosfátovom pufri (pre laktobacily a pediokoky) a v syntetickom médiu (pre *G. candidum*) s prídavkom tyramínu. Získané výsledky ukázali, že všetky testované mikroorganizmy majú potenciál znižovať koncentráciu tyramínu v modelových podmienkach. *Lb. casei* L26 znížil po 48 hodinovej submerznej kultivácii, v porovnaní s kontrolnou vzorkou, v MRS bujóne koncentráciu tyramínu o $63,5 \pm 0,7$ %, vo fosfátovom pufri znížil koncentráciu tyramínu

približne o 37 %. *Pediococcus pentosaceus* 6L3 znížil po submerznej kultivácii v MRS bujóne koncentráciu tyramínu o $53,4 \pm 0,7$ %. Najvýznamnejšie výsledky sme pozorovali u kmeňov *G. candidum*. U týchto kmeňov bola koncentrácia tyramínu po skončení 72 hodinovej kultivácie pod limitom detekcie.

Táto práca bola podporená Slovenskou vedeckou grantovou agentúrou VEGA pre projekt 1/0569/16.

9P06 ANTIOXIDAČNÍ KAPACITA NEROZPUSTNÝCH PODÍLOV POTRAVIN ROSTLINNÉHO PŮVODU

Karel Cejpek¹, Kateřina Formánková¹

¹*Ústav analýzy potravin a výživy, VŠCHT Praha,
Technická 1903, 166 28 Praha 6, cejpek@vscht.cz*

U mnoha potravín je významný podíl antioxidantů navázaný na nerozpustný podíl. Zároveň je naprostá většina metod používaných pro stanovení antioxidační kapacity (AOC) potravin založena pouze na analýze extraktů. Část původně nerozpustných antioxidantů se ovšem může v horní části gastrointestinálního traktu uvolnit a absorbovat. Významný může ale také být přímý antioxidační účinek nerozpustných složek v tlustém střevě. V tomto kontextu tak může být skutečná celková AOC potravin často výrazně podhodnocena.

V experimentální části práce jsme se zabývali aplikací několika variant metody pro stanovení celkové AOC na základě spektrofotometrického sledování zhášení radikálu ABTS⁺, a to jak v rozpustném tak nerozpustném podílu různých potravinářských materiálů bez hydrolýzy. Zkoušeny byly cereální potraviny (pšeničné otruby, popcorn, chlebová kůrka), netradiční přípravky (rakytníkové výlisky a další produkty) nebo nápoje se zákalem (nefiltrovaná piva, ovocné šťávy). U většiny testovaných potravin a přípravků byl v jejich nerozpustných částech nalezen významný podíl látek s antioxidačním účinkem.

Příspěvek vznikl v rámci projektu DS-2016-0020 „Cooperation in research and development of seabuckthorn enriched foods“, který podporuje MŠMT ČR pod CZ ID 8X17020 v rámci výzvy Podunajská spolupráce.

9P07

**RAKYTNÍK REŠETLIAKOVÝ –
VÝZNAMNÝ ZDROJ VOĽNÝCH
AMINOKYSELÍN**

Zuzana Ciesarová¹, Kristína Kukurová¹, Viera Jelemenská¹, Martina Benčíčová², Mária Kopuncová¹, Jana Horváthová¹

¹NPPC Výskumný ústav potravinársky, Priemyselná 4, 824 75 Bratislava

ciesarova@vup.sk

²STU Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav výživy a hodnotenia potravín, Radlinského 9, 812 37 Bratislava

Plody rakytníka rešetliakového (*Hippophae rhamnoides* L.) obsahujú cenné bioaktívne látky, ako sú proteíny, voľné aminokyseliny, nenasýtené mastné kyseliny, jednoduché sacharidy, organické kyseliny, dôležité minerály, vitamíny, zvlášť vitamín C a E, karotenoidy a bioflavonoidy.

Rakytník rešetliakový je bohatý na rôzne voľné aminokyseliny. V plodoch rakytníka odrody *Leikora* pestovaného na Slovensku (PD Tvrdošovce) bolo identifikovaných 21 aminokyselín, 8 z nich je esenciálnych (treonín, valín, metionín, leucín, lyzín, tryptofán, izoleucín, fenylalanín), teda takých, ktoré ľudský organizmus nie je schopný syntetizovať. Obsah voľných aminokyselín v plodoch bol približne 2600 mg/kg, esenciálne aminokyseliny tvorili približne 6,5 %. Profil voľných aminokyselín bol sledovaný aj v produktoch s obsahom rakytníka (šľava, sirup, čajovina a čaj, marhuľový džem s rakytníkom, med s rakytníkom, špaldový, resp. pohánkový koláč s rakytníkom, pohánkové sušienky s rakytníkom). Zvláštna pozornosť bola venovaná obsahu aminokyseliny L-asparagín, ktorá priamo súvisí s tvorbou akrylamidu v tepelne spracovaných produktoch. Akrylamid je nežiaduca látka s karcinogénnymi účinkami, ktorá sa v potravinách tvorí z prirodzene sa vyskytujúcich zložiek (L-asparagín a redukujúce sacharidy) pri teplotách nad 120 °C. Obsah L-asparagínu v rakytníkových plodoch predstavuje približne 90 % všetkých voľných aminokyselín, čo naznačuje vysoký potenciál pre tvorbu akrylamidu pri ich tepelnom spracovaní.

Podakovanie: Príspevok vznikol v rámci projektu APVV-DS-2016-0020 „Spolupráca pri výskume a vývoji potravín obohatených rakytníkom“, ktorý podporuje MŠVVŠ SR prostredníctvom APVV v rámci výzvy Dunajská stratégia. V práci bola využitá infraštruktúra Centra excelentnosti pre kontaminujúce látky a mikroorganizmy v potravinách vybudovaného s

podporou Európskeho fondu regionálneho rozvoja (ITMS 26240120042).

9P08

**RAKYTNÍK REŠETLIAKOVÝ AKO ZDROJ
BIOLOGICKY AKTÍVNYCH LÁTOK**

Zuzana Burčová¹, František Kreps¹, Štefan Schmidt¹, Stanislav Sekretár¹

¹Ústav potravinárstva a výživy, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava

zuzana.burcova@stuba.sk

Práca je zameraná na analýzu sterolov, tokoferolov, mastných kyselín a ďalších biologicky aktívnych zlúčenín zo šupiek, semien a listov rakytníka rešetliakového, ktoré môžu nájsť potenciálne využitie v potravinách, kozmetike a farmakológii. Rozomletá biomasa rakytníka bola podrobená Folchovej extrakcii tukov s cieľom získať extrakty, ktoré sa následne separovali kolónovou chromatografiou. Extrakty a izolované zlúčeniny boli podrobené GC-FID a GC-MS analýze na stanovenie prítomnosti látok s potenciálnou biologickou aktivitou. Dominantnými mastnými kyselinami v semenách sú kyselina olejová (28 % rel.), palmitová (9 % rel.) a linolová (37 % rel.). Šupky rakytníka sú bohaté najmä na kyselinu palmitolejovú (29 % rel.). Prevažujúcim fytosterolom vo všetkých morfológických častiach rakytníka bol beta-sitosterol. Ďalej rakytník obsahoval stigmaterol, campesterol, Δ^5 -avenasterol, citrostadienol a 24-metyléncykloartanol. V semenách bola potvrdená prítomnosť oleoamidu, kyseliny dehydroabietovej, fytolu, dodekanolu a eikozanolu. Kôra rakytníka je bohatá na lupeol a dokozanol. V listoch rakytníka sa potvrdila prítomnosť alfa-amyrínu, alfa-tokospiro-A a hyporaminu. Mnohé z týchto zlúčenín majú antimikrobiálnu, protivírusovú, protizápalovú, protinádorovú a antioxidačnú aktivitu s potenciálnou aplikáciou vo farmakológii, výžive a obohacovaní potravín.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja, na základe zmluvy číslo APVV-0850-11, APVV-0393-14 a APVV-15-0052. Táto práca bola tiež podporená Slovenskou vedeckou grantovou agentúrou VEGA pre projekty 1/0353/16 a 1/0592/15. Ďalej bola podporená grantom pre mladých vedeckých pracovníkov STU pod číslom 1675 a grantami ITMS: 26240120016, ITMS: 26240120028, ITMS: 26240220073, ITMS:26240220084 spolufinancovaných zo zdrojov Európskeho fondu regionálneho rozvoja.

9P09

HODNOTENIE ZDRAVOTNEJ BEZPEČNOSTI VÝROBKOV S OBSAHOM RAKYTNÍKA Z HĽADISKA VZNIKU PROCESNÝCH KONTAMINANTOV

Kristína Kukurová¹, Zuzana Ciesarová¹, Viera Jelemenská¹, Martina Benčíčová², Mária Kopuncová¹, Jana Horváthová¹, Ľubomír Daško¹

¹NPPC VUP, Priemyselná 4, 824 75 Bratislava, kukurova@vup.sk

²STU Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav výživy a hodnotenia potravín, Radlinského 9, 812 37 Bratislava

Počas tepelného spracovania potravín môže okrem pozitívnych zmien z hľadiska údržnosti a organoleptickej kvality dochádzať k vzniku zdraviu škodlivých látok, tzv. procesných kontaminantov ako je akrylamid a hydroxymetylfurfural (HMF). Ich obsah bol monitorovaný v komerčne dostupných výrobkoch s obsahom rakytníka rešetliakového ako sú šťavy, sirupy, džemy a med s obsahom rakytníka. Vo všetkých výrobkoch bol obsah akrylamidu na úrovni limitu stanovenia. Obsah HMF v mede nepresiahol 10 mg/kg. Sirupy a džemy z rakytníka obsahovali od 170 do 219 mg/kg HMF, čo nepredstavuje toxikologické riziko.

V procese pečenia pri teplotách približne 180 °C však so stúpajúcim prídavkom rakytníka do sušienok dochádzalo k významnému nárastu obsahu akrylamidu až na 540 µg/kg, pričom v sušienkach bez rakytníka bol obsah akrylamidu pod limitom stanovenia. Pozorovaný trend bolo možné predpokladať na základe predošlého stanovenia vysokého obsahu aminokyselín s dominantným zastúpením asparagínu ako známeho prekursora akrylamidu, ktorý v použitých plodoch rakytníka bol až 2410 mg/kg. V súčasnosti Európska komisia odporúča, aby v komodite cereálnych výrobkov nebola hodnota akrylamidu vyššia ako 500 µg/kg (tzv. indikatívna hodnota), preto je potrebné pri vývoji nových druhov zdraviu prospešných cereálnych potravín zapracovať vhodné nástroje a technologické opatrenia, ktoré zabezpečia, aby obsah akrylamidu nebol prekročený.

Príspevok vznikol v rámci projektu APVV-DS-2016-0020 „Spolupráca pri výskume a vývoji potravín obohatených rakytníkom“, ktorý podporuje MŠVVŠ SR prostredníctvom APVV v rámci výzvy Dunajská stratégia. V práci bola využitá infraštruktúra Centra excelentnosti pre kontaminujúce látky a mikroorganizmy v potravinách vybudovaného s

podporou Európskeho fondu regionálneho rozvoja (ITMS 26240120042).

9P10

BRUSNICE AKO ZDROJ ZDRAVIU PROSPEŠNÝCH LÁTOK

Eva Hybenová¹, Anna Mikulajová¹, Lukáš Žemlička¹, Monika Slováková¹

¹Ústav potravinárstva a výživy, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava

eva.hybenova@stuba.sk

Brusnice sú významným zdrojom mnohých zdraviu prospešných látok, vrátane organických kyselín, polyfenolov, vitamínov, minerálnych látok, ktorých množstvo sa môže výrazne líšiť vzhľadom na geografický pôvod, klimatické podmienky, stav zrelosti v čase zberu, ako aj spôsob skladovania a spracovania. V práci sme sa zamerali na analýzu vybraných chemických parametrov a hodnotenie antioxidačnej aktivity brusníc (*Vaccinium vitis-idaea* L.) divo rastúcich na Slovensku a zbieraných v rokoch 2015-2016. Brusnice mali vysoký obsah organických kyselín, kyseliny citrónovej a benzoovej, ktoré prispievajú ako k charakteristickej chuti plodov, tak aj k ich inhibičným účinkom na rôzne druhy mikroorganizmov. Najmä kyselina benzoová, ktorej obsah bol 0,794 g/100 g (rok 2016) a 0,944 g/100 g (rok 2015), sa v potravinárstve používa ako konzervačná látka na potlačenie rastu kvasiniek, vláknitých húb a niektorých druhov baktérií.

Brusnice sú bohatým zdrojom rôznych polyfenolových látok, predovšetkým flavonoidov a fenolových kyselín. Obsah celkových fenolov v brusniciach kolísal v závislosti od druhu rozpúšťadla použitého na ich extrakciu a pohyboval sa v rozmedzí od 234,56 do 310,19 mg GAE/100 g brusníc. Z flavonoidových zlúčenín dominujú flavonoly a antokyaníny. Obsah flavonoidov varíroval v rozmedzí 118,80-198,30 mg kvercetínu/100 g brusníc. Z fenolových kyselín boli okrem kyseliny benzoovej stanovené kyselina p-kumarová, kávová, vanilínová a ferulová.

Práca bola realizovaná za finančnej podpory projektu Vega 1/0980/15 „Hodnotenie bioaktívnych prírodných látok a ich využitie v potravinách s preventívno-lekárskymi vlastnosťami“.

9P11**BILANCIA PRÍJMU NUTRIENTOV
V STRAVE ČLOVEKA**

Stanislav Sekretár, Zuzana Burčová, František Kreps,
Štefan Schmidt

*Oddelenie potravinárskej technológie, Ústav
potravinárstva a výživy, Fakulta chemickej a
potravinárskej technológie STU v Bratislave,
Radlinského 9, 812 37 Bratislava,
stanislav.sekretar@stuba.sk*

Práca uvádza možnosti využitia nutričného softvéru pri bilancii príjmu vybraných nutrientov (bielkoviny, sacharidy, tuky, esenciálne mastné kyseliny, cholesterol) a energetického príjmu v strave človeka.

Je dôležité, aby denný príjem jednotlivých nutrientov bol vyvážený tak, aby sa zabezpečila správna funkcia organizmu. Pre tento účel slúžia tzv. „Odporúčané výživové dávky“ (OVD), ktoré uvádzajú odporúčaný denný príjem energie, makro- a mikronutrientov pre jednotlivé skupiny obyvateľstva (deti, muži, ženy podľa veku a fyzickej námahy) [1]. Na základe OVD vznikli tzv. „Odporúčané dávky potravín“ (ODP), ktoré uvádzajú odporúčanú ročnú spotrebu jednotlivých typov potravín (napr. mäso, mlieko, tuky atď.) na obyvateľa [2].

Na základe modelového týždenného jedálneho lístka pre 35-ročného muža so strednou fyzickou záťažou bol vypočítaný denný príjem sledovaných nutrientov. Tuký sú významným zdrojom energie (37 kJ/g) a esenciálnych mastných kyselín [3]. Spolu s cholesterolom patria medzi najčastejšie bilancované nutrienty, preto sme sa im pri výpočtoch venovali podrobnejšie. Z celkového vypočítaného ročného príjmu tukov 33,6 kg bol príjem skrytých tukov 18,5 kg (55,1 %) a príjem viditeľných tukov 15,1 kg (44,9 %). Časť zakúpených viditeľných tukov (5,5 kg/rok) bola použitá len ako teplonosné médium a skončila ako odpad. Pomer skonzumovaných esenciálnych mastných kyselín (n-6) : (n-3) bol 6,96 (podľa OVD sa odporúča 4,5).

Práca bola podporená grantom APVV-14-0393 a grantom VEGA 1/0353/16.

- [1] Kajaba, I., Štencl, J., Ginter, E., Šašinka, M. A., Trusková, I., Gazdíková, K., Hamade, J., Bzdúch, V. (2015). Odporúčané výživové dávky pre obyvateľstvo v Slovenskej republike (9. revízia). *Vestník MZ SR 2015*, čiastka 4-5, str. 19-28.

- [2] Chudíková, K., Havelková, B., Michalovičová, M., Rovný, I. (2005). Hodnotenie výživového stavu obyvateľov Slovenskej republiky vo vzťahu ku kardiovaskulárnemu riziku. *Cardiol* 2005, 14(1) str. 27–36.

- [3] Sekretár, S. (2011). Tuký vo výžive, s. 171-194. In Keresteš, J. (ed.): *Zdravie a výživa ľudí*. CAD Press, Bratislava 2011, 1040 s. ISBN 978-80-88969-37-0.

9P12**VOĽNÉ RADIKÁLY A OXIDAČNÝ STRES
VERSUR OCHRANNÉ ANTIOXIDANTY –
NOVÉ PREKVAPUJÚCE ZISTENIA.**

J. Čársky

*Ústav lekárskej chémie biochémie a klinickej
biochémie, LF UK Bratislava*

Voľné radikály vznikajú v organizme prirodzene, ako vedľajšie produkty metabolismu a biologického spaľovania spojeného s tvorbou energie (ATP). V súvislosti s ich prirodzenou tvorbou je zrejmé, že majú aj svoju biologickú funkciu. Zistilo sa, že pôsobia ako signálne častice aktivácie vnútorného ochranného mechanizmu a udržiavania organizmu v optimálnom stave. Nezastupiteľnú úlohu majú v procese fagocytózy, reprodukcie a tiež v mnohých biochemických procesoch, najmä však v elektrónovom respiračnom reťazci, atď. Pri poruche rovnováhy medzi tvorbou a vychytávaním voľných radikálov antioxidantnými systémami (scavengermi) v organizme dochádza k oxidačnému stresu, ktorý je spojený s patologickými/patobiochemickými zmenami na molekulovej (oxidačné poškodenie lipidov, proteínov, DNA), celulárnej i orgánovej úrovni.

Intenzívne štúdium oxidačného stresu, resp. objav účasti voľných radikálov v molekulovom mechanizme viacerých patologických stavov ľudského organizmu, vrátane neurodegeneratívnych a starnutia, navodilo ich označovanie ako „voľnoradikálové“ ochorenia. V ich prevencii sa odporúča intenzívne využívanie antioxidantných suplementov (vitamínov), ktoré masívnou reklamou nadobudlo charakter nekontrolovaného denného príjmu. Výsledky súčasných vedeckých výskumov však dokazujú, že nadmerné užívanie antioxidantov, najmä vo forme multivitamínových suplementov (suplementova diéta), môže byť pre organizmus škodlivé. Príčinou „voľnoradikálových“ ochorení nemusí byť oxidačný stres, ale tiež porucha iných metabolických procesov. Preto výber a príjem

antioxidantov vo forme suplementov by sa mal starostlivo zvažovať aj z hľadiska ich dopadu na procesy, ktoré nesúvisia s oxidačným stresom. Ako príklad škodlivého účinku antioxidačných suplementov možno uviesť zvýšený výskyt rakoviny pľúc a zníženie doby dožívania u ľudí, zistené pri výskume účinku podávania beta-karoténu a retinolu. Štatistickým spracovaním a vyhodnotením výsledkov dlhodobých početných vedeckých štúdií v USA sa zistilo najmenej 5 %-né zníženie doby dožívania osôb, ktorým sa podávali vitamíny A, E a beta-karotén vo forme suplementov. V reakcii na tieto zistenia sa rozhodli v roku 2013 Americká kardiologická spoločnosť a Americká diabetologická spoločnosť neodporúčať užívanie antioxidačných suplementov, s výnimkou vitamínovej deficiencie, s odôvodnením, že nemajú (najmä vo vysokých dávkach) zdraviu prospešné účinky, a môžu byť škodlivé.

- [1] Sies, H. (Ed.): Oxidants and Antioxidants. Academic Press, London, 1991, 619 s.
- [2] Ďuračková, Z., Bergendi, L., Čársky, J. (Eds): Voľné radikály a antioxidanty v medicíne (II). Slovak Akademik Press, Bratislava 1999, 315 s.
- [3] Perez, V.I. et al: Biochem. Biophys. Acta. 1970 (2009), 1005-1014. 4. Venner Moyer, M., Scientific American. Special Coll. Edition 2015, s. 22-25

9P13

BIOLOGICKY VÝZNAMNÉ LÁTKY KÔRY SMREKA OBYČAJNÉHO

František Kreps¹, Zuzana Burčová¹, Štefan Schmidt¹, Stanislav Sekretár¹

¹Ústav potravinárstva a výživy, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie – STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava

frantisek.kreps@stuba.sk

Kôra smreka obyčajného je zdrojom liečivých látok po stáročia. Napriek tomu predstavuje odpadnú biomasu využívanú najmä ako zdroj tepla, energie a bioplynov. Drevársky priemysel produkuje v Európskej únii 6 - 8 miliónov ton ročne tejto biomasy [1]. V práci sme sa zamerali na využitie kôry ako zdroja biologicky aktívnych látok pre aplikáciu v potravinárstve, kozmetike a farmakológii. Zomletá kôra bola podrobená soxhletovej extrakcii a superkritickej fluidnej extrakcii, pričom sa získali dva etanolové extrakty a ich pre-extrakty do hexánu. Najlepšiu antioxidačnú aktivitu mal etanolový extrakt s 14 – 15 mmol troloxu/mg. Ich antioxidačná kapacita bola spôsobená najmä stilbénmi a synergickým

efektom s metylesterom kyseliny dehydroabietovej. Stilbény slúžia ako chemická ochrana smreka pred bylinožravcami a patogénmi [2] a sú sústredené hlavne v kôre v zastúpení 5 až 10 % [3]. Kôra smreka obyčajného však obsahuje aj látky s významnou antimikrobiálnou aktivitou. Najväčšia inhibičná zóna hexánových pre-extraktov bola potvrdená na baktériách *Pseudomonas aeruginosa* (0,9 - 1,5 cm) a kvasinkových hubách *Alternaria alternata* (0,7 - 1,6 cm). Zatiaľ nebola publikovaná antioxidačná, antimikrobiálna a antifungálna účinnosť výťažkov zo smrekovej kôry z potravinárskeho a kozmetického hľadiska.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja, na základe zmluvy číslo APVV-0850-11, APVV-0393-14 a APVV-15-0052. Táto práca bola tiež podporená Slovenskou vedeckou grantovou agentúrou VEGA pre projekty 1/0353/16 a 1/0592/15. Ďalej bol podporený grantom pre mladých vedeckých pracovníkov STU pod číslom 1675 a grantami s ITMS (26240120016, 26240120028, 26240220073, 26240220084) spolufinancovaných zo zdrojov Európskeho fondu regionálneho rozvoja.

- [1] Ferreira, J. P., Miranda, I., Gominho, J., & Pereira, H.: Industrial Crops and Products, 2015, 74, 998-1007.
- [2] Li, S.-H., Niu, X.-M., Zahn, S., Gershenzon, J., Weston, J., & Schneider, B.: Phytochemistry, 2008, 69(3), 772-782.
- [3] Co, M., Fagerlund, A., Engman, L., Sunnerheim, K., Sjöberg, P. J., & Turner, C.: Phytochemical Analysis, 2012, 23(1), 1-11.

9P14

FENOLY A POLYFENOLY V POTRAVINÁCH A ICH ANTIOXIDAČNÁ AKTIVITA A ZDRAVOTNÁ PROSPEŠNOSŤ

Štefan Schmidt¹, Zuzana Burčová¹, František Kreps¹, Stanislav Sekretár¹, Igor Šurina², Aleš Ház², Michal Jablonský²

¹Ústav potravinárstva a výživy, FCHPT-STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava

²Ústav prírodných a syntetických polymérov, FCHPT-STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
stefan.schmidt@stuba.sk

V prednáške je uvedený prehľad o najnovších výsledkoch výskumu zameraného na zdravotnú prospešnosť fenolových a polyfenolových zlúčenín. Fenolové zlúčeniny, ktoré sú prítomné najmä v rastlinných pletivách, sú neoddeliteľnou súčasťou ľudskej stravy a vzbudzujú značný záujem vďaka svojim antioxidačným vlastnostiam a možným priaznivým účinkom na

zdravie. Tieto zlúčeniny sa svojou štruktúrou pohybujú od jednoduchej fenolovej molekuly až po komplexné polyméry s vysokou molekulovou hmotnosťou. Postupne rastú dôkazy, že konzumácia fenolových zlúčenín prítomných v potravinách môže z dôvodu ich antioxidačnej aktivity znížiť riziko vzniku rôznych neinfekčných zdravotných porúch [1]. Keď sa hodnotia priaznivé zdravotné účinky niektorých fenolových látok, musí sa brať do úvahy aj ich biologická dostupnosť. Vzhľadom na to, že existuje len obmedzený počet štúdií skúmajúcich antioxidačnú aktivitu fenolov a ich metabolitov v prostredí *in vivo*, úplná charakterizácia biologickej dostupnosti a bioaktivity týchto zlúčenín je predmetom intenzívneho výskumu [2].

Antioxidanty majú tiež rozhodujúcu úlohu pri zabránení alebo brzdení rozvoja oxidačného kazenía potravín a ich funkcia je mimoriadne významná i v metabolizme živých organizmov [3]. Potravinárske antioxidanty spomaľujú tvorbu toxických produktov oxidácie, udržiavajú nutričnú kvalitu a predlžujú trvanlivosť produktov. Vzhľadom na bezpečnostné obavy a obmedzenie použitia syntetických antioxidantov, rastie záujem o prírodné antioxidanty. Tento

príspevok zahŕňa najmä prírodné fenolové antioxidanty, zdôrazňujúc ich spôsob pôsobenia v organizme, produkty degradácie a celkové účinky na zdravie. Okrem toho sú stručne diskutované zdroje fenolových antioxidantov.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja, na základe zmluvy číslo APVV-0850-11, APVV-0393-14 a APVV-15-0052. Práca bola tiež podporená Slovenskou vedeckou grantovou agentúrou VEGA pre projekty 1/0353/16 a 1/0592/15. Ďalej bola podporená grantom pre mladých vedeckých pracovníkov č. 1675.

- [1] Fereidoon Shahidi, Priyatharini Ambigaipalan: Phenolics and polyphenolics in foods, beverages and spices: Antioxidant activity and health effects – A review. *Journal of Functional Foods*, 18, 2015, 820–897.
- [2] Massimo D'Archivio, Carmelina Filesi, Rosaria Vari, Beatrice Scacciocchio, Roberta Masella: Bioavailability of the polyphenols: Status and controversies. *International Journal of Molecular Sciences*, 11, 2010, 1321–1342.
- [3] Štefan Schmidt: Antioxidants and Fat Oxidation Changes in Foods (in Slovak), 1st edn., Publishing House STU, Bratislava 2010, p. 220. ISBN 978-80-227-3402-8.

PREDNÁŠKY - SEKCIA 10 CHEMPROGRESS - CHEMICKÉ TECHNOLÓGIE

10P01 VLIV POUŽITÉHO UŠLECHTILÉHO KOVU VE SLITINĚ HLINÍK-KOV NA PRŮBĚH DEHALOGENACE AROMATICKÝCH HALOGENERIVÁTŮ V ALKALICKÉM VODNÉM ROZTOKU

Tomáš Weidlich¹

¹Ústav environmentálního a chemického inženýrství,
Fakulta chemicko-technologická, Univerzita
Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice
tomas.weidlich@upce.cz

Experimentálně bylo prokázáno, že reduktivní dehalogenaci u aromatických halogenderivátů je možné efektivně provádět nejen za katalýzy velmi drahými a na přítomnost katalytických jedů

velmi citlivými platinovými kovy, ale i působením hliníkových slitin, které obsahují měď nebo nikl, jakými jsou Raneyova Al-Ni slitina nebo Devardova slitina [1-3].

Devardova slitina v alkalickém vodném roztoku vykazuje při experimentech s hydrodehalogenací polárních aromatických halogenderivátů, jakými jsou halogenaniliny, halogenované fenoly a halogenované benzoové kyseliny zajímavou selektivitu, která bude v této prezentaci blíže popsána a diskutována. Obecně lze konstatovat, že Devardova slitina umožňuje velmi účinnou a rychlou hydrodebromaci u všech testovaných aromatických bromovaných sloučenin [1].

Raneyova slitina hliník-nikl je neselektivní, velmi účinné hydrodehalogenační činidlo pro všechny dosud testované aromatické halogenderiváty, přičemž u halogenovaných aromatických sulfonových kyselin je hydrodehalogenační reakce doprovázena také desulfonací za vzniku příslušného aromatického uhlovodíku [2-3].

Poděkování Technologické agentuře ČR za finanční podporu projektu TH02030200 „Efektivní

odstraňování aromatických halogenderivátů (AOX) z lokálních průmyslových zdrojů“.

- [1] Tomáš Weidlich, Lubomír Prokeš, Dagmar Pospíšilová: Cent. Eur. J. Chem., (2013), 11(6), 979-987.
- [2] Tomáš Weidlich, Jakub Opršal, Anna Krejčová, Bohumil Jašúrek: Monatsh.Chem. (2015), 146, 613-620.
- [3] Tomáš Weidlich, Lubomír Prokeš: Cent. Eur. J. Chem., (2011), 9(4), 590-597.

10P02

KINETIKA KONVERZNEJ REAKCIE ENERGOSADROVCA

Jana Jurišová¹, Vladimír Danielík¹, Pavel Fellner¹, Milan Králik^{1,2}

¹Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov, FCHPT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, jana.jurisoa@stuba.sk

²VUCHT, a.s., Nobelova 34, 836 03 Bratislava

Energosadrovec je priemyselná surovina vznikajúca ako vedľajší produkt odsírenia spalín zo spaľovania fosílnych palív. Spaliny sú vedené do tzv. „práčky“, do ktorej sa vháňa hmla z vápencového mlieka. Je to suspenzia jemne mletého ťaženého vápenca a vody, ktorá je schopná na seba viazať oxidy síry, pričom vzniká energosadrovec $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$.

Pred zavedením emisných limitov boli v dôsledku vysokej koncentrácie oxidov síry a dusíka bežným javom kyslé dažde, ktoré okrem negatívnych vplyvov (korózia, erózia pôdy) tiež zabezpečovali prísun síry do pôdy. V súčasnosti je už potrebné používať hnojivá s obsahom síry, napríklad síran amónny $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$, dlhodobo pôsobiace dusíkaté hnojivo s významným podielom síry.

Jednou z možností jeho výroby je tzv. konverzná reakcia medzi sadrovcom a zmesou CO_2 a NH_3 alebo pomocou uhličitanu amónneho (Meserburg proces). Kinetika reakcie suspenzie sadrovca s roztokom uhličitanu amónneho sa skúmala v práci [1]. Autori navrhli model, kde predpokladajú chemickú reakciu na povrchu nezreagovaného síranu vápenatého, čiže postupné prekrývanie častíc sadrovca tuhým uhličitanom vápenatým. SEM snímky reakčnej zmesi, v ktorej sú jasne vidno samostatné kryštály sadrovca a vápenca, dokazujú, že daný mechanizmus je v rozpore s realitou. Na základe toho sme vypracovali mechanizmus konverznej reakcie, ktorý predpokladá reakciu v kvapalnej fáze medzi rozpusteným sadrovcom a uhličitanom amónnym.

Experimentálne údaje sme použili na určenie kinetických parametrov.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APVV-14-0217 (Využitie sadry na hodnotné chemické produkty a medziprodukty –EGYVACHEP) a poskytovateľom VUCHT a.s..

- [1] Elkanzi EM and Chalabi MF: Ind. Eng. Chem. Res. 30 (1991) 1289-1293.

10P03

VLIV KRÁTKÝCH KONTROLOVANÝCH ZKRATŮ NA JEDNOTLIVÉ FÁZE PROVOZU PEM PALIVOVÉHO ČLÁNKU

Jakub Malíš¹, Martin Paidar¹, Karel Bouzek¹

¹Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, Praha 6 Dejvice 166 28, jakub.malis@vscht.cz

Palivový článok má jako nezávislý zdroj elektrické energie pro mobilní aplikace celou řadu výhod. Patří mezi ně zejména vysoká efektivita a hustota energie na jednotku hmotnosti a netoxické odpadní produkty. Výkon palivového článku typu PEM je výrazně ovlivňován stavem katalyzátoru a vodivostí polymerní membrány. Druhý parametr silně závisí na stupni zvlhčení vlastní membrány. V případě mobilních aplikací je předpokládáno využití okolního vzduchu coby oxidačního činidla a zároveň chladicího média. Z důvodu špatného přestupu tepla mezi pevnou a plynnou fází však vzduch musí být do článku dodáván ve vysokém nadbytku, což vede k nadměrnému vysoušení membrány.

Aplikace krátkých zkratů palivového článku vede k produkci zvýšeného množství vody, která napomáhá homogennímu zvlhčení membrány v celém jejím objemu. V průběhu provozu dochází na elektrodách palivového článku zároveň ke vzniku celé řady nežádoucích produktů, které mohou urychlit degradaci katalyzátoru. Tyto látky mohou být v některých případech odstraněny již v rámci provozu, krátkodobým zvýšením proudové zátěže. Krátké zkraty aplikované během startu, případně vypínání zařízení mohou výrazně zkrátit tuto proceduru.

Jistý problém však mohou představovat z hlediska připojených zařízení, kdy periodická, krátkodobá přerušování dodávky energie mohou způsobit jejich poškození. Z tohoto důvodu musí být vlastní článek doplněn řídicími a vyrovnávacími členy, které tento negativní vliv potlačí.

Projekt vznikl za podpory Ministerstva vnútra České republiky VI2015201901.

10P04

ELEKTRICKÁ VODIVOST NÍZKOTEPLNOTNÝCH KRYOLITOVÝCH TAVENÍN

Emília Kubiňáková, Vladimír Danielik, Ján Híveš

Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov, Oddelenie anorganickej technológie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita, Bratislava, Slovenská republika, emilia.kubinakova@stuba.sk

Hlinikársky priemysel sa dlhodobo zaujíma o zlepšenie energetickej účinnosti elektrolyzného procesu výroby hliníka. Inovácia výrobných technológií je založená na využití inertných elektródových materiálov a vývoji nízkoteplotných elektrolytov. V súčasnosti sa pracuje s elektrolytmi, obsahujúcimi ako hlavnú zložku kryolit, v ktorých sa nachádzajú prídavky oxidu hlinitého, fluoridu hlinitého, fluoridu vápenatého, prípadne fluoridu lítneho či horečnatého. Elektrolyza prebieha pri teplote okolo (950-960) °C a pracuje sa s uhlíkovými elektródami, ktoré sú, v prípade anód, v priebehu procesu spotrebúvané za vzniku CO₂. Použitie inertných elektródových materiálov so sebou prináša množstvo pozitív. Medzi hlavné výhody patrí vznik kyslíka namiesto CO₂ na inertných (nespotrebúvaných) anódach a práca s nízkoteplotnými taveninovými systémami. Jedná sa najmä o ekologizáciu výroby, zníženie prevádzkových nákladov a zvýšenie energetickej účinnosti procesu.

Vlastnosti nízkoteplotných fluoridových tavenín boli doposiaľ premeriavané len v menšej miere. Práca je zameraná na štúdium elektrickej konduktivity nízkotavitelných fluoridových elektrolytov. Aparatúra na meranie elektrickej konduktivity je založená na rúrkovom type meracej cely, pracovalo sa s elektródou s konštantnou vzdialenosťou elektród a použil sa striedavý sínusový vzruchový signál s malou amplitúdou. Ako meracia technika sa použila elektrochemická impedančná spektroskopia. Namerané údaje elektrických konduktív v nízkotaveninových systémoch v závislosti od teploty a rôznych prídavkov boli vyhodnotené a spracované do regresných rovníc.

Táto práca vznikla za podpory Grantovej schémy pre Podporu mladých výskumníkov Slovenskej Technickej Univerzity v Bratislave.

10P05

PROGRES V ELEKTROCHEMICKEJ PRÍPRAVE ŽELEZANOV

Ján Híveš¹, Kamil Kerekeš¹, Emília Kubiňáková¹

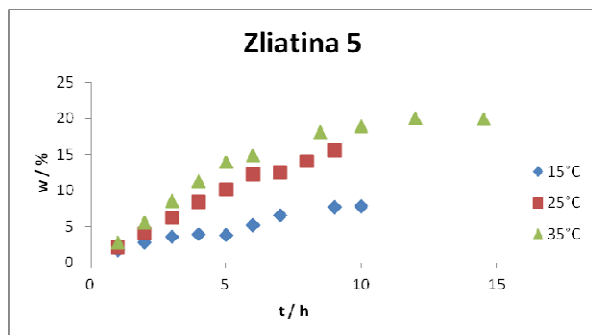
¹*Slovenská technická univerzita, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Oddelenie anorganickej technológie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, jan.hives@stuba.sk*

Železany sú zlúčeniny, ktorých roztoky majú charakteristickú tmavofialovú až čiernu farbu a obsahujú železanový anión [FeO₄]²⁻. Sú menej bežnými zlúčeninami železa v oxidačnom stupni +6. Základné vlastnosti železanov, ktoré v najväčšom meradle ovplyvňujú ich následné použitie, sú najmä enormná oxidačná sila, nestabilita, rozpustnosť, prípadne ich reaktivita [1]. Železany sú nestabilné zlúčeniny, čo je spôsobené vysokou elektrónovou afinitou šesťmocného železa. Rýchlosť rozkladu závisí od hodnoty pH, teploty, od ich počiatočnej koncentrácie a od prítomnosti koexistenčných iónov. Železany sú stabilné v silne alkalických roztokoch s minimálnym obsahom nečistôt, stabilita napomáha aj udržiavanie relatívne nízkej teploty - okolo 0 °C. Pri laboratórnej teplote je práškový suchý železan stabilný, zahrievaním sa však rozkladá za súčasného uvoľňovania kyslíka [2].

Spôsoby prípravy železanov je možné rozdeliť podľa použitého oxidačného činidla na chemické (suchá a mokrá oxidácia) a elektrochemické. Podľa použitého prostredia môžeme elektrochemické procesy deliť na syntézu v tavenine a syntézu vo vodných roztokoch. V našej práci sme sa zaoberali elektrochemickou prípravou železanov v koncentrovaných roztokoch hydroxidov (NaOH, KOH) v rozsahu pracovných teplôt (5 – 80) °C. Práca nadväzuje na predchádzajúci výskum elektrochemickej výroby železanov pomocou nových typov vysokolegovaných Fe anódových materiálov. Experimentálna časť práce sa zaoberá hľadím optimálneho pomeru a zastúpenia legúr anód pri výrobe Na₂FeO₄ elektrolyzou v NaOH. Predmetom záujmu je vplyv teploty, prúdovej hustoty a koncentrácie hydroxidu v anolyte na maximálnu koncentráciu vznikajúceho železanu a prúdovú účinnosť procesu pre jednotlivé zliatiny [3].

Na základe porovnania výsledkov môžeme povedať, že jednoznačne najlepšími anódovými materiálmi boli ocele typu 4, 5, 9 a 12 a to aj z pohľadu maxima koncentrácie vznikajúceho

železanu ako aj z pohľadu prúdovej účinnosti procesu. Pri zliatine 5 sme dosiahli koncentráciu železanu na úrovni 20 hm. %. Za pomoci tejto zliatiny dokážeme opakovane pripraviť (10-15) hm. % Na_2FeO_4 pri (40-80) mA/cm^2 a prúdovej účinnosti (50-60) %, pričom hmotnostný pomer železan sodný / hydroxid sodný dosahuje hodnotu až 1:1. Horšie výsledky sme dosiahli pre zvyšných 9 zliatin, ale z pohľadu aplikácie nových anódových materiálov na báze vysokolegovaného železa môžeme aj tieto výsledky považovať za prínos. Potvrdil sa predpoklad postupnej aktivácie elektródy, kde sme už pri druhej elektrolyze dosahovali viditeľné zlepšenie prúdovej účinnosti procesu a zvýšenie množstva vznikajúceho železanu. Pri zvýšení prúdovej hustoty sme síce dosiahli zvýšenie množstva vzniknutého železanu v krátkom čase, ale prúdová účinnosť bola menšia. Vplyv teploty sa počas meraní tak isto prejavil výraznejšie, kde pri zvýšení teploty o 10 °C sme dosiahli viditeľné zvýšenie prúdovej účinnosti procesu z čoho vyplýva aj zvýšenie množstva vzniknutého železanu.



Obr. 1. Závislosť hmotnostného zlomku Na_2FeO_4 v anolyte od času elektrolyzy pri troch rôznych teplotách, elektrolyt 40 hm. % NaOH, prúdová hustota 40 mA/cm^2 , teplota elektrolyzy je naznačená v obrázku.

Tento príspevok vznikol vďaka podpore MŠVVaŠ SR v rámci grantovej schémy VEGA, projekt č. 1/0543/15.

- [1] Mácová Z., Brouzek K., Híveš J., Sharma V. K., Terry R. J., Baum J. C., *Electrochimica Acta*. 54(2009), p. 2673-2683.
- [2] J. Híveš, M. Gál, K. Kerekeš, E. Kubiňáková, and T. Mackuľák, ACS Symposium Series 1238, ed. Sharma et al., American Chemical Society, Washington, DC, 2016, p.221-240.
- [3] E. Kubiňáková, K. Kerekeš, M.Gál, J. Híveš, Electrolytic ferrate preparation in various hydroxide molten media, *J. of Applied Electrochemistry* 45(2015), 1035-1042.

10P06

BIOTLAČ BIOSYNTETICKÝCH TUBULÁRNYCH SUBSTITUENTOV POŠKODENEJ ĽUDSKEJ MOČOVEJ RÚRY

Dušan Bakos¹, Ida Vašková¹ Viera Jančovičová¹, Michal Čeppan¹

¹Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU, Radlinského 9/1111, 812 37 Bratislava
dusan.bakos@stuba.sk

Biotlač sa považuje za techniku additívnej výroby tkanív, kde bunky a biomateriál (bioink - bioatrament) sa simultánne ukladajú do požadovaného tvaru. Inkjet (atramentová) tlačiareň nanáša malé kvapôčky bioatramentu (1–100 picolitra; 10–50 μm priemer) na preddefinované miesto na substráte. Piezoelektrická atramentová tlačiareň využíva piezoelektrické kryštály na vytváranie akustických vln pre vypudenie kvapaliny cez dýzu. Pre tlač sú dôležité fyzikálne chemické parametre prekursora hydrogél, ako reologické chovanie, napúšacie charakteristiky, povrchové napätie a kinetika gélovatenia. Biotlač umožňuje konštrukciu 3D tubulárnych tkanív ako sú cievy, alebo močová rúra. Pri biotlačí tubulárnych systémov, ako je močová rúra (uretra), je snaha využiť modifikovanú komerčnú atramentovú tlačiareň prispôbenú na tlač buniek ukotvených v bioatramente. Súčasne pre rýchle fyzikálne sieťovanie bioatramentu sa využije aplikácia sekundárnych kvapiek zrážadla, označovaných ako satelitné kvapky. Pre počiatočné štúdium sa zvolili algináty, ktoré môžu byť sieťované dvojmocnými iónmi ako je Ca^{2+} alebo Mg^{2+} kation. Študuje sa nastavenie fyzikálno-chemických parametrov pre veľmi špecifické požiadavky tlače a v ďalšom viabilita tlačených buniek v sieťovanom bioatramente. Rovnako sa nastavujú parametre pre substrát, alebo gélový povlak (biopapier), ktorý je schopný prijímať bioatrament v ktorom sú zhľuky buniek. Pre konštrukciu uretry sa dá použiť viacvrstvá s bunkami, ktorá sa dá zrolovať do požadovaného tubulárneho tvaru, alebo sa použije priamo vytlačený dimenzovaný tubulárny skafold, ktorý potom bude „dozrievať“ v bioreaktore, kde dôjde v prostredí média ku komunikácii medzi bunkami a k tvorbe uceleného tkaniva. Ako vidieť, ide o interdisciplinárny prístup, vyžadujúci si veľmi úzku komunikáciu medzi konštruktérmi zariadenia pre biotlač, chemikmi, biológmi a v konečnom dôsledku aj špecialistami – lekármi.

Štúdium je podporované Agentúrou na podporu výskumu a vývoja v aplikovanom výskume v projekte ARTEFURETHRA - APVV-15-0111.

- [1] Katja Hölzl, Shengmao Lin, Liesbeth Tytgat, Sandra Van Vlierbeghe, Linxia Gu, Alexandr Ovsianikov: *Biofabrication* 8 (2016) 032002

- [2] Hemanth Gudapati, Maduri Dey, Ibrahim Ozbolat: *Biomaterials* 102 (2016) 20-42

PREDNÁŠKY CENA SHIMADZU

Sh01

UTILIZATION OF FAST SCAN DIFFERENTIAL PULSE VOLTAMMETRY AND FLOW SYSTEMS FOR DETERMINATION OF ANTIOXIDANTS

Dmytro Bavor, Hana Dejmeková, Jiri Zima, and Jiri Barek

Charles University in Prague, Faculty of Science,
Department of Analytical Chemistry, University
Research Centre Supramolecular Chemistry,
UNESCO Laboratory of Environmental
Electrochemistry, Albertov 6, CZ-128 43 Prague 2,
Czech Republic
dmytro.bavor@natur.cuni.cz

This study presents newly developed methods of antioxidants determination performed by fast scan differential pulse voltammetry (FSDPV) and flow injection analysis (FIA) or high performance liquid chromatography (HPLC) system, using a glassy carbon electrode (GCE) as a working electrode in a wall-jet arrangement. The first step, was characterization of electrochemical detection by monitoring the performance of the detector system in dependence on the parameters of determination such as flow rate, scan rate, and length of the loop using the well known model redox systems. These characterizations were optimized in a similar way as they had been previously studied [1, 2]. After characterization at FIA arrangement [3], the combination of FSDPV with HPLC system under similar conditions was successfully reproduced. During the development of the method, conditions for determination of analytes of standards were optimized, the separability, the repeatability, and the concentration characteristics in standard solutions were performed. Finally, as an exemplary application, the determination of the antioxidants

contained in tea samples was carried out by applying a simple extraction procedure.

The main advantages of the combination of FSDPV and flow methods are speed of measurement together with high information gain (particularly in the case of combination with FIA), detection of substances with similar retention times but with a different potential of oxidation (in case of combination with HPLC), and use of small amount of the sample, which still enables the application to the detection of micromolar analytes quantities.

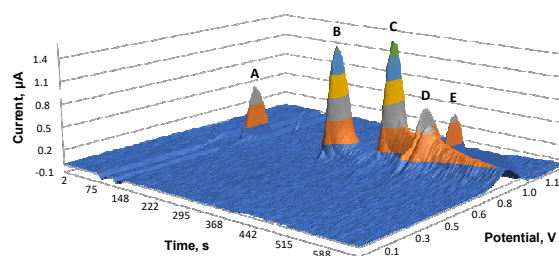


Fig. 1. Three-dimensional representation of HPLC-FSDPV recordings of one repeated injection (20 μL) of mixture of polyphenols (gallic acid - **A**, caffeic acid - **B**, rutin - **C**, sinapic acid - **D**, and ferulic acid - **E**); $c = 100 \mu\text{mol L}^{-1}$; at GCE in mixture of acetonitrile:B-R buffer pH 2.5 (0 min: 15:85; 11 min: 30:70, v/v); column: Purospher STAR RP-C18 ($12.5 \times 0.4 \text{ cm ID}$, $5.0 \mu\text{m}$); scan rate: 5 V s^{-1} ; flow rate: 0.8 ml min^{-1} .

This research was carried out within the framework of Specific University Research (SVV260440).

- [1] W. L. Caudill, A. G. Ewing, S. Jones, and R. M. Wightman, *Analytical Chemistry* **1983**, 55, 1877–1881.
[2] J. G. White, R. L. Stclair, and J. W. Jorgenson, *Analytical Chemistry* **1986**, 58, 293–298.
[3] D. Bavor, H. Dejmeková, M. M. Scampicchio, J. Zima, and J. Barek, *Electroanalysis* **2017**, 29, 182–187.

Sh02

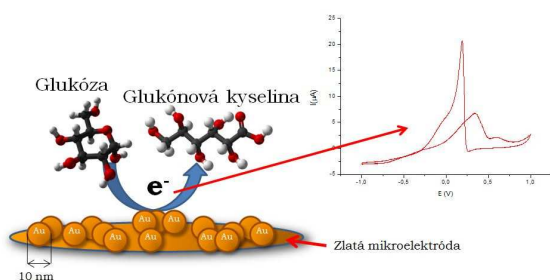
ELEKTROCHEMICKÉ STANOVENIE
GLUKÓZY NA ZLATÝCH
MIKROELEKTRÓDACH

Jana Hovancová^{1*}, Ivana Šišoláková¹, Renáta Oriňáková¹, Andrej Oriňák¹

¹Univerzita Pavla Jozefa Šafárika, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Katedra fyzikálnej chémie, Moyzesova 11, Košice 040 01

*jana.hovancova@student.upjs.sk

Zlato je na základe jeho mimoriadnych elektrokatalytických vlastností považované za vhodného kandidáta pre vývoj neenzymatických glukózových senzorov [1]. Navyše zlaté nanočastice majú v porovnaní s ostatnými kovmi lepšiu prúdovú odozvu, biokompatibilitu a schopnosť detegovať glukózu v neutrálnom aj zásaditom prostredí [2]. Zlaté mikroelektrody (s priemerom 1 mm) boli použité za účelom ich aplikácie ako neenzymatických senzorov. Ich dostatočne malé rozmery poskytujú aj priestor pre miniaturizáciu systému. Pre vytvorenie optimálnych podmienok bol študovaný mechanizmus elektrochemickej oxidácie glukózy na zlatom povrchu, ktorý bol zároveň porovnaný s literatúrou. Okrem iného, bol študovaný aj vplyv pH na priebeh elektrochemického deja. Po navrhnutí optimálnych podmienok, bol povrch elektrody modifikovaný zlatými nanočasticami, aby bol dosiahnutý vyšší počet aktívnych miest a zlepšenie senzorických vlastností. Na zlatých mikroelektrodách bolo možné detegovať glukózu v lineárnom rozmedzí koncentrácií od 0,5 mM po 40 mM, pričom požiadavka kladená na glukózové senzory je približne v rozmedzí koncentrácií od 1 mM po 30 mM.



Obr. 1. Schematické znázornenie zlatej mikroelektrody modifikovanej zlatými nanočasticami.

Táto práca vznikla na základe podpory grantov VEGA 1/0074/17, Vedeckej grantovej agentúry a APVV-16-0029, Agentúry na podporu výskumu a vývoja.

- [1] K.E. Toghill, R.G. Compton, Electrochemical non-enzymatic glucose sensors: A perspective and an evaluation, *Int. J. Electrochem. Sci.* 5 (2010) 1246–1301. doi:10.1016/j.ccr.2016.04.01.
- [2] S. Karra, M. Wooten, W. Griffith, W. Gorski, Morphology of Gold Nanoparticles and Electrocatalysis of Glucose Oxidation, *Electrochim. Acta.* 218 (2016) 8–14. doi:10.1016/j.electacta.2016.09.097.

Sh03

BIOPROSPEKCE ROSTLIN *CANNABIS SATIVA*, VÝVOJ METODY
METABOLOMICKÉHO
FINGERPRINTINGU PRO SELEKCI
ODRŮD

Jiří Hricko¹, Alena Zachariášová¹ a Milena Stránská¹

¹Ústav analýzy potravin a výživy, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6 - Dejvice

Konopí seté (*Cannabis sativa*) vykazuje celou řadu pozitivních účinků na lidské zdraví. Důvodem je přítomnost značného množství biologicky aktivních látek, mezi které patří zejména fytoKANABINOIDY. Díky tomu je konopí nadějným zdrojem nových biologicky aktivních látek, využitelných například v medicíně či potravinářství.

Práce se zabývá optimalizací analytické metody necílového screeningu využívající separaci a detekci pomocí ultra-účinné kapalinové chromatografie a vysokorozlišovací hmotnostní spektrometrie (U-HPLC-HRMS) s hmotnostním analyzátozem typu Q-TOF. Optimalizován byl zejména krok extrakce, který je klíčový pro izolaci širokého spektra přítomných bioaktivních látek. Jako nejvhodnější extrakční rozpouštědla byla zvolena směs ethanol:voda 80:20, v/v pro izolaci polárnějších látek a směs dichlormethan:methanol 50:50, v/v pro extrakci méně polární části metabolomu. Extrakční postup byl dále aplikován v rámci bioprospekce rostlin *Cannabis sativa* pěstovaných za různých kultivačních podmínek. Kromě analýz chemického složení pomocí metody U-HPLC-HRMS byla realizována i stanovení antioxidační aktivity metodou DPPH. Naměřená data byla chemometricky zpracována metodami multivariační analýzy a byly identifikovány markery charakterizující jednotlivé skupiny experimentálního materiálu. Podařilo se rozdělit všech pět měřených odrůd konopí (*Santhica*, *Uniko-B*, *Finola*, *Bialobrzaskie* a *Carmagnola*).

Cenným výstupom je také databáze 243 fytoanabinoidů (obsahující informace o přesné hmotě, sumárním a strukturním vzorci), která může být v budoucnu využívána pro cílový screening těchto látek a hodnocení odrůd konopí.

Tato práce vznikla jako součást grantového projektu Charakterizace a selekce C. sativa po potravinářské i nepotravinářské využití pomocí biotechnologických postupů a vysokokapacitních metod (TAČR TA04010331).

Sh04

FOSFOPROTEOMICKÁ ANALÝZA PROCESOV RÁDIOSENZIBILIZÁCIE NÁDOROVEJ LÍNIE NEMALOBUNKOVÉHO KARCINÓMU PLŮC OVPLYVNENEJ INHIBÍTOROM AUTOFÁGIE LYS05

Martin Ondrej¹, Lucie Čecháková¹, Ivo Fabrik²,
Barbora Šalovská³, Aleš Tichý¹

¹Katedra rádiobiologie, Fakulta vojenského zdravotnictva v Hradci Králové, Univerzita obrany

²Katedra molekulární patologie a biologie, Fakulta vojenského zdravotnictva v Hradci Králové, Univerzita obrany

³Oddělení genomové integrity, Ústav molekulární genetiky AV ČR v Praze
martin.ondrej@unob.cz

Autofágia je primárny bunkový proces umožňujúci bunkám prežiť v podmienkach zvýšenej stresovej záťaže ako je hladovanie, nedostatok kyslíku či ionizujúce žiarenie. Je založená na recyklácii vlastných makromolekúl a organel a tvorbe nových, pre prežitie nevyhnutných makromolekúl a energie. Preto je autofágia považovaná za cytoprotektívny mechanizmus a vo veľkej miere využívaná nádorovými bunkami (tiež počas rádioterapie), ktoré sa tak stávajú rezistentnými. Inhibícia cytoprotektívnej autofágie sa preto javí ako možný spôsob radiosenzibilizácie nádorových buniek. Doposiaľ bolo syntetizovaných niekoľko potenciálnych inhibítorov, ale úplný mechanizmus radiosenzibilizácie nebol zatiaľ objasnený [1,2].

Pre objasnenie mechanizmov radiosenzibilizácie sme v našom experimente využili analýzu SILAC založenú na princípoch kvantitatívnej fosfoproteomiky. Ako model nám poslúžila línia nemalobunkového karcinómu pľúc H1299 (nádor v praxi liečený ožarovaním), ktorú sme v experimente ovplyvnili inhibítorom autofágie Lys05 [3]. Experimentálny postup sme postavili na základoch „shotgun“ proteomiky, pričom

frakciu fosfopeptidov sme získali obohatením pomocou TiO₂ mikrosfér a následne identifikovali/kvantifikovali použitím LC-MS/MS. Celkovo sme identifikovali viac ako 1100 proteínov. Signifikantne modifikované proteíny sa podieľali najmä na metabolických a biosyntetických procesoch a tiež na procesoch bunkovej odpovede na stres. Okrem toho sme pozorovali proteíny podieľajúce sa na regulácii dráhy mTOR (hlavná regulačná dráha autofágie). V ďalších experimentoch sa budeme snažiť overiť a bližšie špecifikovať doterajšie zistenia.

Táto práca vznikla za finančnej podpory Ministerstva obrany Českej republiky – dlhodobého zámeru rozvoja organizácie Zdravotnícka problematika zbraní hromadného ničenia Fakulty vojenského zdravotníctva Univerzity obrany.

- [1] Amber N. Halea, Dan J. Ledbettera, Thomas R. Gawriluka, Edmund B. Rucker: Autophagy (2013)
- [2] Eeva-Liisa Eskelinena, Paul Saftigb: BBA – Molecular Cell Research (2009)
- [3] Ravi K. Amaravadi, Jeffrey D. Winkler: Autophagy (2012)

Sh05

VYUŽITIE HPLC-MALDI TOF/TOF ANALÝZY DERIVATIZOVANÝCH GLYKÁNOV V DIAGNOSTIKE PORÚCH METABOLIZMU GLYKOKONJUGÁTOV

Zuzana Pakanová, Peter Baráth, Jana Ziburová, Marek Nemčovič, Sergej Šesták, Mária Matulová, Ján Mucha

Chemický ústav SAV, Centrum Excelentnosti pre Glykomiku, Dúbravská cesta 9, 845 35 Bratislava,
zuzana.pakanova@savba.sk

V dôsledku rôznych metabolických porúch dochádza k výrazným zmenám v štruktúrach glykokonjugátov v ľudských telesných tekutinách. Analytické techniky, ako offline HPLC-MALDI TOF/TOF, boli využité ako nástroj pre sledovanie týchto zmien v prípadoch kongenitálnych porúch glykozylácie (CDG) a vybraných porúch degradácie glykogénu (GSD). U CDG-suspektného pacienta bola dokázaná abnormálna glykozylácia na úrovni celkového glykoproteínu séra, ako aj glykoproteínu klinických biomarkerov (apolipoproteínu CIII a transferínu), čím sa zúžila analýza potenciálne chybných génov z pôvodných cca 250 na približne 20. Na základe získaných výsledkov je pravdepodobné, že sa bude jednať o doposiaľ nedefinovaný CDG-subtyp. Metóda hmotnostnej spektrometrie okrem sledovania porúch v syntéze glykokonjugátov otvára možnosti diagnostiky porúch aj v degradácii týchto molekúl. V našej práci bola

vyvinutá a optimalizovaná metóda rýchleho skríningu Pompeho ochorenia s derivatizáciou priamo na MALDI platni, vyžadujúca iba 0,05 µl moču pacienta. Zavedené a optimalizované metódy na stanovenie porúch v syntéze i katabolizme glykokonjugátov tak môžu byť aplikované aj v ďalšej diagnostickej praxi a stať sa tak významnou súčasťou spolupráce klinikov a výskumných pracovníkov.

Táto záverečná práca vznikla vďaka podpore v rámci operačného programu Výskum a vývoj pre projekt: Centrum excelentnosti pre Glykomiku, ITMS 26240120031, spolufinancovaný zo zdrojov Európskeho fondu regionálneho rozvoja; VEGA 2/0188/14 a VEGA 2/0007/13.

Sh06

AMBIENTNÍ HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIE: POVRCHOVÁ ANALÝZA OD PLANÁRNÍCH VZORKŮ K NEPLANÁRNÍM

Jan Rejšek^{1,2}, Vladimír Vrkoslav¹, Josef Cvačka^{1,2}

¹Ústav organické chemie a biochemie Akademie věd České republiky, Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha 6

²Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Hlavova 8, 128 43 Praha 2

jan.rejssek@uochb.cas.cz

Desorpční fotoionizace za atmosférického tlaku (DAPPI) a desorpční ionizace elektrosprejem (DESI) patří mezi ionizační techniky ambientní hmotnostní spektrometrie. DAPPI využívá horký sprej par rozpouštědla a nebulizačního plynu k desorpci analytu a UV lampy k jeho ionizaci. DESI je technika založená na extrakci analytu z povrchu a jeho ionizaci elektrosprejem.

Původní verze iontového zdroje vyrobeného v naší laboratoři umožňovala automatický posuv vzorku v osách x a y, a tudíž analýzu planárních objektů [1]. Cesta od povrchové analýzy planárních vzorků k neplanárním začala u tenkovrstvé chromatografie (TLC). Nejprve byla testována schopnost DAPPI-MS ionizovat a detekovat různé lipidy z TLC desek. Poté byly vyvinuté metody použity ke zjišťování chemického složení novorozeneckého mazu a rostlinných olejů. Separace lipidů do tříd byla provedena na normálních fázích, zatímco jednotlivé sloučeniny v rámci lipidových tříd byly rozděleny na reverzních fázích.

V nedávné době byla v naší laboratoři vyrobena nová verze iontového zdroje určená pro analýzu neplanárních vzorků. Je vybavená automatickým

posuvem v ose z a senzorem pro měření vzdálenosti pracujícím na principu optické triangulace. Nejdříve byla studována funkčnost iontového zdroje na pravidelných geometrických tělesech vytištěných na 3D tiskárně a pokrytých vrstvou kyseliny 2,5-dimethoxybenzoové. Dále bylo studováno praktické použití tohoto zdroje při analýze potravinářských a farmaceutických vzorků.

Tato práce byla financována Grantovou agenturou Univerzity Karlovy v Praze (projekt č. 232515).

[1] Jan Rejšek, Vladimír Vrkoslav, Anu Vaikkinen, Markus Haapala, Tiina J. Kauppila, Risto Kostianen, Josef Cvačka: Analytical Chemistry 88, 12279 (2016)

Sh07

ANALÝZA A IDENTIFIKÁCIA 5-FLUOROCYTOZÍNU A JEHO METABOLITOV V KOMPLEXNÝCH BIOLOGICKÝCH MATRICIACH S VYUŽITÍM HPLC-HRMS

Pavel Škvára¹, Monika Radičová¹, Nikoleta Bihercová¹, Miroslava Matúšková², Erika Ďuriníková², Andrea Vojs Staňová¹

¹Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra analytickej chémie, Ilkovičova 6, Mlynská Dolina, 842 15, Bratislava, Slovenská republika

skvara1@uniba.sk

²Slovenská akadémia vied, BMC, Ústav experimentálnej onkológie, Laboratórium molekulárnej onkológie, Dúbravská cesta 9, 845 05 Bratislava, Slovenská republika

Narastajúci počet prípadov výskytu onkologických ochorení zvyšuje záujem o výskum a vývoj nových protinádorových liečiv a liečebných postupov. Jedným z najväčších problémov použitia protinádorových liečiv je ich nešpecifický účinok na organizmus (pôsobia na choré aj zdravé bunky), čo spôsobuje zvýšenie celkovej toxicity[1]. Jednou z možností ako obmedziť nárast celkovej toxicity je použitie liečebného postupu samovražednej génovej terapie s použitím vhodného prekurzora pre ciele chemoterapeutikum. Takýmto typom prekurzora je 5-fluorocytosín, ktorý sa metabolicky premieňa na protinádorové chemoterapeutikum 5-fluorouracil[2].

Cieľom práce bola analýza a identifikácia 5-fluorocytosínu a jeho hlavných metabolitov (5-fluorouracil, 5-fluorouridín, 5-fluorouridín monofosfát, 5-fluoro-2-deoxyuridín monofosfát) vo vzorkách nádorových a mezenchýmových

kmeňových buniek pomocou kombinácie techník vysokoúčinnnej kvapalinovej chromatografie a vysokorozlišovacej hmotnostnej spektrometrie. Pre chromatografickú separáciu bola použitá kolóna Ascentis C18 (100 mm x 2,1 mm, 3 µm) s využitím gradientovej elúcie (10 mmol/l kyselina mravčia : acetonitril, 10:90%, (v/v)) a s prietokom mobilnej fázy 0,2 ml/min. Hmotnostne spektrometrická detekcia bola vykonaná na vysokorozlišovacom hmotnostnom spektrometri LCMS-IT-TOF™ (Shimadzu, Kyoto, Japonsko) s ionizáciou elektrosprejom v pozitívnom aj negatívnom ionizačnom móde. Vyvinutá HPLC-ESI-IT-TOF-MS metóda bola úspešne použitá na analýzu komplexných biologických matric (kultivačné médium odobraté z nádorových a mezenchýmových kmeňových buniek) a identifikáciu 5-fluorocytosínu a jeho hlavných metabolitov bez využitia zložitej úpravy vzoriek.

Predložená práca vznikla za finančnej podpory Grantu Univerzity Komenského (UK/321/2017) a Agentúry na podporu výskumu a vývoja (APVV-0583-11 a APVV-0052-12) pod záštitou Centra excelencie VVCE-0070-70.

- [1] Massimo Breda, Simona Barattè: Analytical and Bioanalytical Chemistry, (2010)
- [2] Virginia Ramos-Martín, Olya O'Connor, William Hope: Current Opinion in Pharmacology (2015)

Sh08

SELEKTIVNÍ IZOLACE HYDROFOBINU SC3 A JEHO NÁSLEDNÁ PROTEOMICKÁ ANALÝZA

Miroslava Zelená¹, Rudolf Kupčík², Pavel Řehulka³, Zuzana Bílková², Lenka Česlová¹

¹Katedra analytické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10, Pardubice, Česká republika

²Katedra biologických a biochemických věd, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10, Pardubice, Česká republika

³Katedra molekulární patologie a biologie, Fakulta vojenského zdravotnictví, Univerzita obrany, Třebešská 1575, 500 01, Hradec Králové, Česká republika

Hydrofobiny jsou malé proteiny, obsahující typický vzor osmi cysteinů, které jsou propojeny čtyřmi disulfidickými můstky. Hydrofobiny vykazují výraznou povrchovou aktivitu a schopnost samoshluknutí na různých typech rozhraní. V této práci byla vyvinuta nová metoda pro izolaci hydrofobinu SC3 (*Schizophyllum commune*), využívající vysokou hydrofobicitu

těchto proteinů a silnou afinitu k teflonu jako adsorpčnímu činidlu. Pomocí teflonových mikročastic byl selektivně izolován hydrofobin SC3 z modelových směsí proteinů. Tato technika je velmi efektivní, časově nenáročná a představuje velký potenciál pro izolaci hydrofobinů z reálných vzorků. Účinnost izolace hydrofobinů byla ověřena pomocí tricínové SDS-PAGE. Identifikace hydrofobinu SC3 byla provedena pomocí MALDI-MS s využitím dvou typů analyzátorů – analyzátor doby letu (TOF) a orbitální past (Orbitrap). Pro analýzu na MALDI-TOF/TOF hmotnostním spektrometru byl použit intaktní hydrofobin, ale před analýzou na peptidové úrovni pomocí MALDI-Orbitrap bylo nutné protein nejprve enzymaticky naštěpit. Na základě obsahu aminokyselin v primární struktuře analyzovaného proteinu bylo enzymatické štěpení provedeno pomocí chymotrypsinu a thermolysinu. Úspěšnost štěpení je podmíněna efektivní redukcí a alkylací disulfidických můstků, jelikož hydrofobiny jsou jimi vysoce stabilizované. Pro redukcí bylo použito redukční činidlo Tris(2-karboxyethyl)fosfinhydrochlorid v kombinaci s hydrochloridem guanidinu nebo deoxycholátem sodným s následnou alkylací jodoacetamidem. Úspěšnost enzymatického štěpení byla ověřena pomocí tricínové SDS-PAGE. Vzniklé peptidy byly analyzovány pomocí MALDI-MS.

Práce byla financována z grantu SGS_2017_001 Univerzity Pardubice.

Sh09

VOĽBA PARAMETROV KOMBINOVANEJ QUECHERS S DISPERZNOU MIKROEXTRAKCIOU V SYSTÉME KVAPALINA-KVAPALINA (DLLME) NA IZOLÁCIU REZÍDUÍ PESTICÍDOV Z BAVLNENÝCH PRODUKTOV

Silvia Zichová¹, Dušan Palacka¹, Svetlana Hrouzková¹

¹Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav analytickej chémie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
silviazichova@gmail.com

Záujem o nové prístupy úpravy vzorky neustále rastie aj v dôsledku vysokého počtu aplikácií na multireziduálnu analýzu pesticídov v zložitých maticiacich. V súčasnosti sa venuje zvýšená pozornosť kombináciám konvenčných a novších techník, ako spojenie QuEChERS (rýchla, jednoduchá, lacná, efektívna, robustná a bezpečná) techniky s DLLME. DLLME

predstavuje mikroextrakčnú techniku, ktorá využíva tri rôzne kvapaliny- vodnú fázu, s vodou nemiešateľné organické rozpúšťadlo spravidla ťažšie ako voda a disperzné rozpúšťadlo dobre miešateľné s oboma komponentami. Kombinovaná technika QuEChERS- DLLME poskytuje výhody, ako sú vysoká rýchlosť extrakcie, jednoduchosť jednotlivých krokov, nízka cena, dosahovanie vysokých obohacovacích faktorov a používanie malých objemov organických rozpúšťadiel poriadkovo v mikrolitroch. Spomínaná kombinovaná technika bola použitá na extrakciu širokej skupiny pesticídov zo zložitých komplexných matric s obsahom tukov [1] alebo z ovocia [2].

Predkladaná práca bola zameraná na voľbu podmienok kombinovanej techniky QuEChERS- DLLME na extrakciu pesticídov, ktoré majú endokrinne disruptčné účinky [3], z bavlenných produktov. Pesticídy boli extrahované z tuhej matrice acetonitrilom v prvej fáze postupu QuEChERS a následne zakoncentrované pomocou DLLME do organického rozpúšťadla

s objemom v desiatkach mikrolitroch. Pozornosť sa venovala parametrom extrakcie, ako výberu extrakčného rozpúšťadla a jeho objemu, objemu disperzného rozpúšťadla, prídavku solí, pH a i. Extrahované pesticídy sa následne separovali a stanovili metódou rýchlej plynovej chromatografie v spojení s hmotnostnou spektrometriou.

Túto prácu podporila Slovenská agentúra pre výskum a vývoj na základe zmluvy č. SK-SRB-2016-0006. SZ ďakuje programu STU za finančnú podporu v rámci Grantovej schémy na podporu mladých výskumníkov.

- [1] M. Andraščíková, S. Hrouzková, Food Anal Methods 9, 2182 (2016).
- [2] M. Andraščíková, S. Hrouzková, S. C. Cunha, Food Addit Contam A 30, 286 (2013).
- [3] S. Hrouzková and A. Páleníková, “ Endocrine Disrupting Chemicals: Occurrence, Exposures and Health Risks“, S. Johnston (Ed), Nova Science Publishers, New York, 2016, p.13.

POSTERY - SEKCIA 1 ANALYTICKÁ CHÉMIA

1Po01

MATRIX ASSISTED AND/OR LASER DESORPTION IONISATION QUADRUPOLE ION TRAP TIME-OF- FLIGHT MASS SPECTROMETRY OF WO₃ CLUSTERS FORMATION IN GAS PHASE. NANODIAMONDS AND GRAPHENE OXIDE MATRICES

Mayuri Ausekar¹, Ravi Mawale¹, Pavel Pazdera¹, Josef Havel¹

¹Department of Chemistry, Faculty of Science,
Masaryk University, Kamenice 5/14, 625 00, Brno,
Czech Republic
441691@mail.muni.cz

The WO₃ is multifunctional material and has unique characteristics. It brings wide range of applications in biomedicine, cosmetics, electronics, coatings and plastics, catalysis, etc. [1-2]. It was studied for its various properties such as electrochromism, photocatalysis, and/or sensing capabilities, for example [3]. In this work

Laser Desorption Ionization (LDI) with QIT-TOF-MS was used to study the generation of WO₃ clusters in gas phase and the formation of (WO₃)_n^{+/-} (*n*=1-7) was detected (Fig. 1). When nanodiamonds and graphene oxide were used as matrices, the spectra in positive ion mode were found more complex than in negative one and higher (WO₃)_n⁻ (*n*=1-19) clusters were detected. In addition to (WO₃)_n⁻ clusters also some oxygen rich and/or oxygen deficient species were found in both LDI and MALDI methods. The total number of clusters identified was over one hundred. Finally, the use of carbonaceous matrices enabled observation of high mass (WO₃)_n⁻ clusters (*n* up to 19) for the first time. The knowledge of generation of high mass tungsten oxide clusters in gas phase and clusters stoichiometry can be useful to develop new materials.

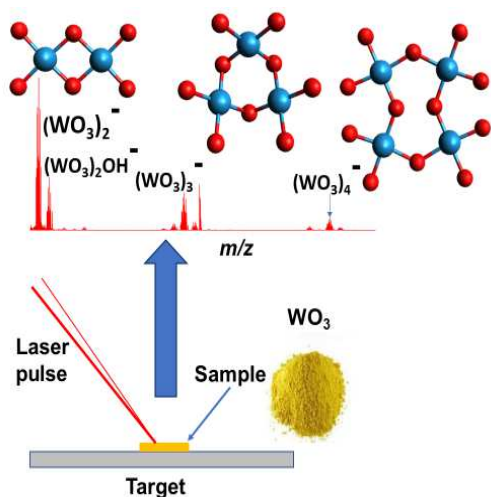


Fig. 1. General scheme of LDI-TOF mass spectrometry set up for generation of tungsten oxide clusters in gas phase. The structures of $(\text{WO}_3)_n^-$ clusters were calculated by Avogadro program.

Acknowledgement

Masaryk University is acknowledged for travel grant to M. A. and financial support for this work. New graphene oxide was obtained as a gift from company Grafenex Ltd., Czech Republic, e-mail for communication: mirek.pitrocha@grafenex.cz.

- [1] A. Ivan Gavriluk: Aging of the nanosized photochromic WO_3 films and the role of adsorbed water in the photochromism. *Appl. Surf. Sci.* 364, 498–504, (2016).
- [2] Haidong Zheng, Jian Ou, Michael Strano, Richard Kaner, Arnan Mitchell, Kourosh Kalantar-Zadeh: Nanostructured tungsten oxide - Properties, synthesis, and applications. *Adv. Funct. Mater.* 21, 2175–2196, (2011).
- [3] Vyomesh Buch, Amit Chawla, Sushant Rawal: Review on electrochromic property for WO_3 thin films using different deposition techniques. *Mater. Today Proc.* 3, 1429–1437, (2016).

1Po02

STÁRNUTÍ ROZTOKU CHLORIDU BARNATÉHO A JEHO VLIV NA TURBIDIMETRICKÉ STANOVENÍ SÍRANŮ

Kateřina Bednářová¹, Ivona Sedlářová¹, Jan Vídenský¹

¹Ústav anorganické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6 – Dejvice, Česká republika
bednarok@vscht.cz

Při využití turbidimetrie ke stanovení koncentrace síranových iontů, jehož podstatou je srážení síranu barnatého pomocí roztoku chloridu barnatého, bylo zjištěno, že stáří připraveného

činidla má zásadní vliv na charakter sraženiny síranu barnatého a tím i na hodnotu změřené turbidity. Cílem této práce bylo studium možných vlivů způsobujících „stárnutí“ roztoku chloridu barnatého a určení vhodných podmínek srážení síranu barnatého pro následné turbidimetrické stanovení koncentrace síranů. Byly provedeny experimenty s roztoky chloridu barnatého s různou dobou zrání a/nebo připravenými za různých podmínek. Z výsledků vyplynulo [1], že „stárnutí“ roztoku chloridu barnatého se ustálí přibližně po dvou týdnech a k podobné změně vlastností tohoto roztoku dojde rovněž po jeho převaření nebo filtraci přes velmi jemnou filtrační přepážku. Přes zjištěné skutečnosti je pro stanovení síranů pomocí turbidimetrie výhodnější použít čerstvý roztok chloridu barnatého, který sice poměrně rychle mění pro srážení síranu barnatého své vlastnosti, ale určení neznámé koncentrace je i vzhledem k vyšší hodnotě směrnice kalibrační přímky přesnější.

- [1] Bednářová, K., Vliv stárnutí roztoku chloridu barnatého na turbidimetrické stanovení síranů: bakalářská práce. VŠCHT Praha, 2016.

1Po03

SPEKTRO-ELEKTROCHEMICKÉ VLASTNOSTI NANOSTRUKTUROVANÉHO STŘÍBRNÉHO AMALGÁMU ELEKTRODEPONOVANÉHO NA ITO

Aleš Daňhel¹, Peter Šebest¹, Pavlína Vidláková¹, Filip Ligmajer^{1,2,3}

¹Biofyzikální ústav, Akademie věd České republiky, v.v.i., Královopolská 135, 612 65 Brno, Česká republika

²Central European Institute of Technology, Vysoké učení technické v Brně, Technická 10, 616 00 Brno, Česká republika

³Ústav fyzikálního inženýrství, Vysoké učení technické v Brně, Technická 2, 616 69 Brno, Česká republika
danhel@ibp.cz

Stříbrný amalgám se osvědčil jako vhodný elektrodový materiál pro přípravu pracovních i referentních elektrod. [1] Kromě jednoduché amalgamace kovů nebo elektrodepozice rtuti na stříbrný podklad, je možné připravit stříbrný amalgám chemicky redukcí stříbrných iontů přítomnou kovovou rtutí nebo jiným redukčním činidlem a nebo elektrochemickou ko-redukcí obou iontů na zvolené vodivé podklady. Těmito způsoby lze připravit kubické, planární i jehlicovité krystaly stříbrného amalgámu a nebo

deponovat mikročástice či mikrokrystaly např. na ITO či jiné vodivé podklady.

Takto připravené (mikro)elektrody nebo pole mikroelektrod vykazují široké potenciálové okno srovnatelné se rtuťovými elektrodami (vysoké přepětí vodíku) a jejich nanostrukturovaný povrch zvyšuje efektivitu přenosu náboje vůči depolarizátorům přítomným na povrchu elektrod, což v některých případech vede ke zvýšení proudové hustoty a nebo ke snížení potenciálu redukce zkoumaného analytu.

Perspektivní se jeví využití tohoto materiálu pro konstrukci spektroeletrochemických cel. Vysoké odrazivosti světla v UV/Vis oblasti (>80 %) a nebo buditelnosti povrchových plasmonů, může být využito pro nové účely zkoumání elektrochemického chování širokého spektra analytů, zejména pak např. interakcí biopolymerů (DNA, RNA, proteiny a další) na povrchu stříbrného amalgámu, což může vést k vývoji nových (bio)senzorů. [2,3]

Tato práce vznikla za finanční podpory Grantové agentury České republiky (projekt 17-23634Y).

- [1] A. Danhel, J. Barek, *Curr. Org. Chem.*, 15 (2011) 2957–2969.
- [2] A. Henglein, C. Brancewicz, *Chem. Mater.*, 4756 (1997) 2164–2167.
- [3] L. Katsikas, M. Gutiérrez, A. Henglein, *J. Phys. Chem.*, 100 (1996) 11203–11206.

1Po04

DETERMINATION OF HOMOGENITIC ACID USING HPLC WITH AMPEROMETRIC DETECTION ON GLASSY CARBON PASTE ELECTRODE

Hana Dejmková¹, Maria Lozano¹, Jiří Zima¹

¹Charles University, Faculty of Science, Department of Analytical Chemistry, University Research Centre Supramolecular Chemistry, UNESCO Laboratory of Environmental Electrochemistry, Albertov 6, CZ-128 43 Prague 2, Czech Republic dejmkova@natur.cuni.cz

Homogentisic acid is an intermediate of the metabolic breakdown of tyrosine and phenylamine; its accumulation in body fluids suggests the break in the metabolic pathway of these compounds and related health-threatening complications [1,2]. In our work, determination method for this compound was developed using HPLC with amperometric detection on glassy carbon paste electrode. Optimum conditions were found, considering both electrode response and chromatographic parameters. Separation was performed on Kromasil 100 C18, 250 x 4,6 mm

(5µm) column using gradient elution; mobile phase consisted of acidic buffer and methanol, with methanol content changing from 5% to 30% in 10 min. Repeatability of the measurement and linearity of the electrode response was confirmed. Applicability of the method was proved by the determination in spiked urine sample.

This work was financially supported by the Czech Science Foundation (Project P206/12/G151).

- [1] W. Hsua, C.M. Chena, F.J. Tsaia, C.C. Laic: *Clinica Chimica Acta* 420, 140-1459 (2013).
- [2] A.T. Hughes, A.M. Milan, AS. Davison, P. Christensen, G. Ross, J.A. Gallagher, J.J. Dutton: *Annals Clinical Biochemistry* 52 (5), 597-605 (2015).

1Po05

STANOVENÍ SPEKTRA MASTNÝCH KYSELIN V TUKOVÉ TKÁNI VEGANŮ A OMNIVORŮ POMOCÍ PLYNOVÉ CHROMATOGRAFIE.

Martin Jaček¹, Jan Gojda^{2,3}, Lenka Rossmeislová³, Petr Tůma¹

¹Ústav biochemie, buněčné a molekulární biologie, 3. lékařská fakulta, Univerzita Karlova, Ruská 87, 100 00 Praha 10, Česká republika

²II.interní klinika FNKV a 3. lékařské fakulty, Univerzita Karlova, Ruská 87, 100 00 Praha 10, Česká republika

³Ústav pro studium obezity a diabetu, 3. lékařská fakulta, Univerzita Karlova, Ruská 87, 100 00 Praha 10, Česká republika
martin.jacek@volny.cz

Složení stravy je jedním z klíčových faktorů pro rozvoj inzulinové rezistence jako předstupně diabetu melitu 2. typu, jehož incidence je v západní společnosti na trvalém vzestupu. Lidé stravující se výhradně rostlinnou potravou (vegani) mají lepší hodnoty glukózové tolerance, lipidového profilu a nižší inzulinovou rezistenci, než lidé bez dietních omezení (omnivoři) [1] a také riziko vzniku diabetu 2. typu, je u vegenů výrazně nižší. Z tohoto důvodu představují vegani vhodný model pro studium vlivu různých dietních intervencí, např. Diety se zvýšeným obsahem rozvětvených aminokyselin na uvedené parametry [2].

Cílem naší práce bylo porovnání profilu mastných kyselin ve vzorcích tukové tkáně skupiny 21 veganů a 20 omnivorů (kontrolní skupina) před dietní intervencí. Stanovení základního profilu mastných kyselin bylo provedeno na plynovém chromatografu Shimadzu GC-17A s FID detektorem, koloně Stabilwax

(Restek) o rozměrech 15 m × 0,25 mm × 0,1 μm a průtoku hélia 1,2 ml/min. Stanovení cis/trans C18:1 izomerů bylo provedeno na koloně SLB-IL111 (Supelco) o rozměrech 100 m × 0,25 mm × 0,2 μm za použití vodíku jako nosného plynu o průtoku 2,1 ml/min.

Z naměřených dat vyplývá, že vegani mají v tukové tkáni statisticky významně nižší hladinu nasycených mastných kyselin (171 mg/g) než omnivoři (231 mg/g). Hladina mononesycených mastných kyselin, zastoupených téměř výhradně kyselinou olejovou, je u obou skupin zhruba shodná (729 vs 773 mg/g). Množství polynenasycených mastných kyselin, reprezentované hlavně kyselinou linolovou, je u skupiny veganů dvojnásobné oproti skupině omnivorů (103 vs 202 mg/g). Výsledky analýzy cis/trans izomerů C18:1 navíc poukazují na statisticky významně nižší hladinu trans C18:1 izomerů u skupiny veganů (3,7 vs 5,1 mg/g).

Tato práce vznikla s podporou projektu Ministerstva zdravotnictví České republiky NT/14416, programu PRVOUK P31 a PROGRES Q36 Univerzity Karlovy v Praze a projektu Grantové agentury České republiky GA15-03139S.

- [1] Goff L. M., Bell J. D., So P. W., Dornhorst A., Frost G. S., *Eur. J. Clin. Nutr.*, 2005, 59, 291–298.
- [2] Gojda J., Rossmeislová L., Straková R., Tůmová J., Elkalaf M., Jaček M., Tůma P., Potočková J., Krauzová E., Waldauf P., Trnka J., Štich V., Anděl M., *Eur. J. Clin. Nutr.* 2017 71(5), 594–601.

1Po06

MASS SPECTROMETRY OF GRAPHENE AND GRAPHENE OXIDE

Lenka Kolářová¹, Ravi Mawale¹, Pavel Pazdera¹ and Josef Havel¹

¹Department of Chemistry, Faculty of Science, Masaryk University, Kamenice 5, 625 00 Brno, Czech Republic

Graphene (G) and graphene oxides (GO) show exceptional physicochemical properties such as high electrical and thermal conductivity, extreme physical strength of carbon backbone, chemical tunability and nearly perfect transparency. They possess a high potential for applications in many scientific branches and in technology [1]. Fragmentation of G to carbon clusters was already studied [2, 3], but there is lack of information about GO ionization and fragmentation. Mass spectrometry (MS) of GO is still not sufficiently studied and described [2, 3]. In this work, the ionization of G and GO by laser

desorption ionization MS equipped with a combination of quadrupole ion trap and time-of-flight 140nalyser was studied. The purpose was to understand processes of GO ionisation. This knowledge might help to understand the structure of GO. In conclusion, it was found that GO preparatives consist of many various sizes GO fragments forming a complex aggregate of single layers of GO “leaves” which are incorporating various GO molecules in between the layers (Fig. 1, arrows) and carrying varied number of oxo, hydroxyl or carboxyl groups. Some of GO fragments can be exfoliated using different solvents. In addition, carbon clusters C_n (n up to 350) were observed. The results will be discussed in detail.

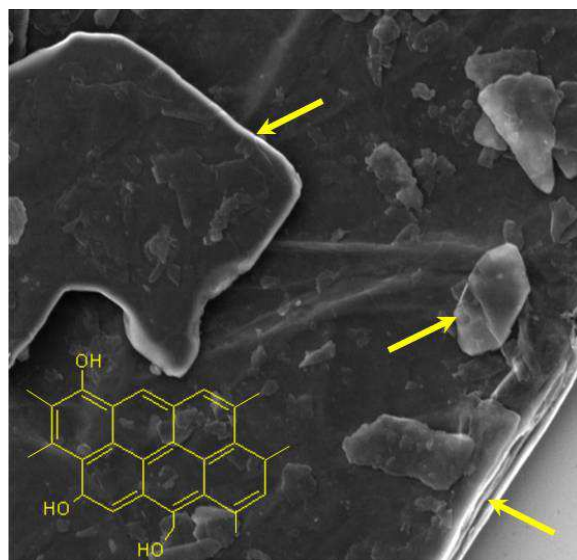


Fig. 1. SEM image of graphene oxide.

Acknowledgements. Masaryk University is acknowledged for travel grant to L.K. and financial support for this work. New graphene oxide was obtained as a gift from company Grafenex Ltd., Czech Republic, e-mail for communication: mirek.pitrocha@grafenex.cz.

- [1] By Yanwu Zhu, Shanthi Murali, Weiwei Cai, Xuesong Li, Ji Won Suk, Jeffrey R. Potts, and Rodney S. Ruoff, Graphene and Graphene Oxides: Synthesis, Properties and Applications, *Adv. Mater.* 22(35), 3906–3924, (2010)
- [2] Sun Jong Baek, Min Sun Kim, and Hyun Sik Kim, Rigorous Even-Number Rule in the Formation of Carbon Cluster Cations by Laser Ablation of Graphene Oxide, *Bull. Kor. Chem. Soc.*, 36(3), 739–740 (2015)
- [3] Xianglei Kong, Yi Huang, and Yongsheng Chen, Difference in formation of carbon cluster cations by laser ablation of graphene and graphene oxide, *J. Mass Spectrom.* 47, 523–528, (2012)

1Po07**ZAVEDENÍ METODIKY IZOLACE RNA Z CD14+ MONONUKLEÁRNÍCH BUNĚK A JEJÍ REVERZNÍ TRANSKRIPCE A AMPLIFIKACE METODOU PCR.**Karolína Křenková¹, Michal Haluzík²¹*Ostravská Univerzita, Přírodovědecká fakulta, 30. Dubna 22, 701 00, Ostrava, kkrenkova@seznam.cz*²*Ostravská Univerzita, Přírodovědecká fakulta, 30. Dubna 22, 701 00, Ostrava
michal.haluzik@osu.cz*

V roce 2014 byla na našem pracovišti zavedena metodika izolace CD14+ mononukleárních buněk z periferní krve metodou, která je založena na využití gradientové centrifugace.

Mononukleární buňky představují důležitý marker, který lze využít při monitorování a hodnocení celé řady patofyziologických stavů (zánětlivá reakce, kardiovaskulární onemocnění, nádorová onemocnění). Na základě množství mononukleárních buněk a identifikace a kvantifikace některých prozánětlivých faktorů jimi produkovanych, je možné také sledovat projevy a intenzitu zánětlivých reakcí, které provází obezitu a metabolický syndrom [1].

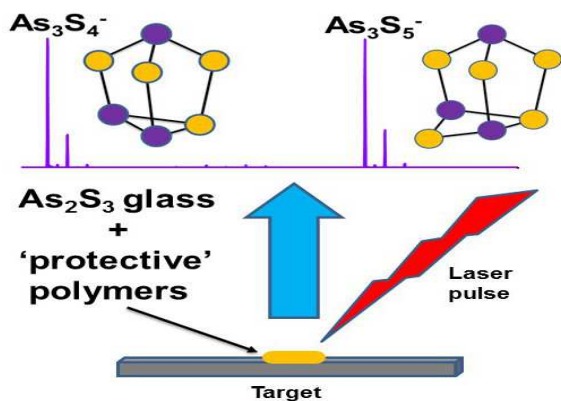
Pro monitorování produkce a kvantifikaci prozánětlivých cytokinů se v současné době využívá některých moderních biochemických a molekulárně biologických metod. Tyto metody umožňují na úrovni genové exprese jak kvalitativně, tak i kvantitativně stanovit sledované cílové molekuly. Jednou z nejpoužívanějších technik, která výše uvedené splňuje, je „real time“ PCR.

Výchozím materiálem pro zmíněnou techniku je komplementární cDNA (complementary DNA) získaná reverzní transkripcí RNA izolované z příslušného biologického vzorku, v našem případě z CD14+ monocytů. Vzhledem k tomu, že produktem reverzní transkripce je hybridní RNA-DNA molekula, která není vhodná k další analýze, je nutné sledované strukturní geny kódující prozánětlivé cytokiny amplifikovat pomocí PCR. Takto vzniklý produkt (cDNA) lze následně použít jako matrici pro „real time“ PCR [2].

1. ZIEGLER-HEITBROCK, L.: Nomenclature of monocytes and dendritic cells in blood. *Blood*. 2010, vol. 116, e74–e80. ISSN 1528-0020.
2. High capacity cDNA reverse transcription kit. Product bulletin reverse transcription PCR. Applied Biosystems 2006. California, USA.

1Po08**APPLICATION OF PROTECTIVE POLYMERS FOR FRAGMENTATION REDUCTION IN COURSE OF LASER DESORPTION IONIZATION EXPLOITED FOR MASS SPECTROMETRY CHARACTERIZATION OF CHALCOGENIDE GLASSES**Ravi Mawale¹, Petr Němec², Josef Havel¹¹*Department of Chemistry, Faculty of Science, Masaryk University, Kamenice 5/A14, 625 00, Brno, Czech Republic*²*Department of Graphic Arts and Photophysics, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentská 573, 53210 Pardubice, Czech Republic*

Chalcogenides were studied since long time due to their important applications in photonics, ultrafast switching, ultra-high-density phase-change storage and memories, integrated fibre optics, biosensors, etc.[1]. Recently, we showed that LDI TOFMS is useful for the partial structure characterization [2-3]. However, the use of LDI TOFMS has some limitations because a fragmentation of basic structural entities forming the structure of the material may occur. In this work, LDI TOFMS afforded with quadrupole ion trap was used to study As_2Ch_3 ($Ch = S, Se, \text{ and } Te$) bulk chalcogenide materials. The generated clusters are formed either due to fragmentation of the basic structural units or to some extent they can be created through the reactions of highly energetic species present in the plasma plume. LDI breaks the glass structure yielding fragments which can be considered as parts of the original structure. Therefore, we examined herewith the use of some “protective” polymers to reduce destruction process. The fragmentation of glasses was diminished using some polymers. This novel approach widens applicability of LDI MS, enables to get more complex insight into the structure of these materials and opens new possibilities of LDI TOFMS analysis for chalcogenides and also other laser sensitive materials.



Acknowledgement. Masaryk University is acknowledged for travel grant to R.M. and supporting this work.

- [1] Jean-Luc Adam, Xianghua Zhang (Eds.): Chalcogenide Glasses. Preparation, Properties and Applications. Woodhead Publishing, Cambridge, (2014).
- [2] Sachinkumar Dagurao Pangavhane, Petr Němec, Virginie Nazabal, Alain Moreac, Pal Jóvári, Josef Havel: Laser desorption ionization time-of-flight mass spectrometry of erbium-doped Ga-Ge-Sb-S glasses. *Rapid Commun. Mass Spectrom.*, 28 1221-1232 (2014).
- [3] Katerina Šutorová, Lubomir Prokeš, Virginie Nazabal, Marek Bouška, Josef Havel, and Petr Němec: Laser Desorption Ionisation Time-of-Flight Mass Spectrometry of Chalcogenide Glasses from $(\text{GeSe}_2)_{100-x}(\text{Sb}_2\text{Se}_3)_x$ System. *J. Am. Ceram. Soc.*, 98, 4107-4110 (2015).

1Po09

ANALYSIS OF ZINC IN THE ENCHYTRAEUS CRYPTICUS ORGANISM

Jan Patočka¹, Klára Stojárová¹, Kateřina Hrdá¹, Anna Krejčová¹, Miloslav Pouzar¹

¹Department of Environmental and Chemical Engineering, University of Pardubice, CZ-532 10 Pardubice, Czech Republic
st30721@student.upce.cz

The elemental analysis of annelids of the Enchytraeus genus is not described in the literature in details. Usually, a versatile sample preparation approach of digesting in concentrated acids such as HNO_3 and HClO_4 is used with the subsequent elemental analysis using spectral methods such as ICP-MS, ICP-OES and AAS [1, 2]. The aim of this study was to develop a routine sample preparation procedure and find a suitable analytical method for the Enchytraeus Crypticus (EC) organism and agarose gel samples coming from the ecotoxicological tests

monitoring the toxicity of zinc oxide nanoparticles (ZnO-NPs) and ZnCl_2 .

In the test (96 hours), 20 EC individuals were placed into a Petri dish containing 55 mL of agarose gel with addition of zinc. The survived individuals were separated from agarose gel and dissolved in tetramethylammonium hydroxide. Agarose gel was digested in HNO_3 . The samples were analysed using ICP-OES. The Zn procedural limits of detection for EC organism and agarose gel 830 and $1.8 \mu\text{g kg}^{-1}$ are sufficient considering the Zn concentration levels used in ecotoxicological tests. The Zn background concentration in EC 60.1 ± 11.3 was comparable with $82 \pm 23 \text{ mg kg}^{-1}$ from literature. Bioaccumulation factors were found 57-180 for ZnCl_2 and 23-65 for ZnO-NPs.

The authors would like to acknowledge the support of the University of Pardubice, Faculty of Chemical Technology project SG FCHT 05/17.

- [1] N. Cedergreen, P. E. Holm, H. Marcussen: Ecotoxicology, (2013)
- [2] K. Hrda, J. Oprsal, P. Knotek, M. Pouzar, M. Vlcek: Chemical Papers, (2016)

1Po10

DETERMINATION OF TIN TRACES IN WATER SAMPLES BY ADSORPTIVE STRIPPING VOLTAMMETRY

Przemysław Piątek, Małgorzata Grabarczyk

Faculty of Chemistry, Maria Curie-Skłodowska University, M.C. Skłodowska sq.3, 20-031 Lublin, Poland
przemyslawpiatek@onet.pl

Tin is one of the essential trace elements which are involved in various metabolic processes in plants, animals and man. Besides ingestion from food, it is introduced into the human environment both as inorganic tin and as organotin compounds. Consequently, there has been growing concern about the significance and toxicity of this element and this, in turn, has encouraged the development of methods for its determination in various sample materials.

Adsorptive stripping voltammetry (AdSV) is an alternative to other methods for determination of ultra-traces of tin in water samples. The main advantages of AdSV are low cost and portable instrumentation and most of all low detection limit. This communication describes AdSV procedures for the determination of traces of tin in natural water in the presence of different complexing ligands [1-3].

- [1] F. Heppeler, S. Sander, G. Henze, *Analytica Chimica Acta* 319 (1996) 19-24,
- [2] Yi-Heng Li, Hui Long, Fang-Qin Zhou, *Analytica Chimica Acta* 554 (2005) 86-91,
- [3] D. monticelli, R. Psaro, A. Pozzi, *Anal Bioanal Chem* 383 (2005) 115-121,

1Po11

VYUŽITIE TECHNIKY DÁVKOVANIA JEMNEJ SUSPENZIE S ATÓMOVOU ABSORPČNOU SPEKTROMETRIOU S ELEKTROTERMICKOU ATOMIZÁCIOU NA STANOVENIE A ŠPECIÁCIU CHRÓMU Z VODNÝCH VZORIEK

Simona Procházková¹, Katarína Kriegerová¹, Radoslav Halko¹

¹*Katedra analytickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Ilkovičova 6, Mlynská dolina CH-2, 842 15 Bratislava, simona.prochazkova@uniba.sk*

Znečistenie životného prostredia ťažkými kovmi je závažným celosvetovým environmentálnym problémom súčasnosti, a vzhľadom na ich schopnosť akumulácie v živých a neživých systémoch, aj budúcnosti. Snahou analytických chemikov je navrhnúť a vypracovať také postupy pre úpravu vzoriek, ktoré sú jednoduché, bezpečné, finančne nenáročné, a použitie ktorých vedie k získaniu spoľahlivých výsledkov [1 – 3]. Predložená práca sa zaoberá vývojom novej analytickej metódy na stanovenie a špeciáciu chrómu(III) a chrómu(VI) vo vodných vzorkách. Na špeciáciu a koncentrovanie uvedených dvoch foriem chrómu bola použitá extrakcia tuhou fázou s využitím nanočastíc ZrO₂, ktorý v závislosti od extrakčných podmienok selektívne koncentroval len jednu formu chrómu. Pri optimálnych podmienkach sa Cr(III) kvantitatívne sorboval pri pH 7,0 – 10,0 a Cr(VI) pri pH 2,5 – 4,0, pH prostredia sa upravovalo pomocou systému zloženého z vodných roztokov NH₄OH a HNO₃. Hodnota výťažnosti extrakcie pre Cr(III) sa pohybovala v rozmedzí od 90 – 100 % a pre Cr(VI) v rozmedzí 88 – 99 %. Na stanovenie špecií chrómu bola použitá atómová absorpčná spektrometria s elektrotermickou atomizáciou a technika dávkovania jemnej suspenzie s atómovou absorpčnou spektrometriou s elektrotermickou atomizáciou. V oboch detekčných technikách bola použitá teplota termického rozkladu 1500 °C a teplota atomizácie 2300 °C. Hodnota medze detekcie pre Cr(III) bola 0,27 µg l⁻¹ a pre Cr(VI) 0,48 µg l⁻¹. Vyvinutá metóda bola overená analýzou štandardného

referenčného materiálu NIST 1643e a úspešne použitá na stanovenie a špeciáciu Cr(III) a Cr(VI) vo vybraných vzorkách vôd.

Práca vznikla za finančnej podpory grantovej agentúry MŠ SR VEGA, grantov č. 1/0897/15, 1/0899/16, Agentúry na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APVV-0583-11 a grantu Univerzity Komenského v Bratislave č. UK/243/2017.

- [1] Halko R., Procházková S., Okenicová L., Hutta M., Božek P.: *Chromatographia*. 77, 1019 (2014).
- [2] Okenicová L., Žemberyová M., Procházková S.: *Environ. Chem. Lett.* 14, 67 (2015).
- [3] Procházková S., Halko R.: *Anal. Lett.* 49, 1 (2016).

1Po12

THE THERMODYNAMIC AND KINETIC PROPERTIES OF LEAD(II) COMPLEXES WITH TETRA-AZAMACROCYCLIC LIGANDS

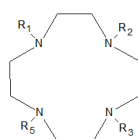
Viktorie Reichová¹, Přemysl Lubal^{1,2}, Petr Hermann³

¹*Masaryk University, Faculty of Science, Department of Chemistry, Kotlářská 2, 611 37 Brno*

²*Masaryk University, Central European Institute of Technology (CEITEC), Kamenice 5, 625 00 Brno*

³*Charles University, Faculty of Science, Department of Inorganic Chemistry, Hlavova 2030, 128 40 Prague*

^{203/212}Pb(II) macrocyclic compounds have potential applications in cancer theranostics [1,2]. In order to use these complexes in cancer therapy, the metal complexes must be biologically inert and not prone to dissociation upon administration to the body. This work examines the thermodynamic and kinetic properties of Pb(II) complexes with the cyclen-based tetraaza-macrocyclic ligands (see Figure 1) in order to better understand the formation and dissociation behavior of these complexes. It has been determined that the formation kinetics are strongly dependent on the number of pendant arms present on the cyclen skeleton, with Pb(DOTA) and Pb(DO3A) having the fastest rates of formation. This trend is also observed in the dissociation kinetics. An explanation of these resulting trends and likely mechanisms of complex formation and dissociation are also proposed.



Ligand Name	R1	R2	R3	R4
Cyclen	H	H	H	H
DO2A	COOH	H	COOH	H
DO3A	COOH	COOH	COOH	H
DOTA	COOH	COOH	COOH	COOH

Figure 1 Structure of some of the ligands investigated in this work.

This study was supported by the Ministry of Education of the Czech Republic (CEITEC 2020 – LQ 1601), the Grant Agency of the Czech Republic (No. 13-08336S) and Masaryk University (MUNI/A/1237/2016).

- [1] C.S. Cutler, H.M. Hennkens, N. Sisay, S. Huclier-Markai, S.S. Jurisson, *Chem. Rev.*, **2013**, 113(2), 858-883.
- [2] C.G. Pipin, T.J. McMurphy, M.W. Brechbiel, M. McDonald, R. Lambrecht, D. Milenic, M. Roselli, D. Colcher, O.A. Gansow, *Inorg. Chim. Acta* **1995**, 239(1-2), 43-51.

1Po13

SEPARACE LÁTEK OBSAHUJÍCÍCH FOSFÁTOVOU SKUPINU KAPILÁRNÍ ELEKTROFORÉZOU S VYUŽITÍM NOVĚ PŘIPRAVENÉHO LIGANDU NA BÁZI PYRIDNU

Pavel Řezanka¹, Martina Hegrová¹, Kamil Záruba¹

¹ Vysoká škola chemicko-technologická, Ústav analytické chemie, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika
Pavel.Rezanka@vscht.cz

Nově připravený ligand na bázi pyridinu byl použit jako přídavek do základního elektrolytu pro kapilární elektroforézu a byly studovány jeho vazebné vlastnosti s látkami obsahujícími fosfátovou skupinu. Příprava ligandu vycházela z 2-(chlormethyl)pyridinu a 1,3-diaminopropan-2-olu. Po vzniku příslušného ligandu byl vytvořen komplex se zinečnatými ionty, které se také podílí na komplexaci fosfátové skupiny. Vzniklý komplex byl charakterizován pomocí nukleární magnetické rezonance. Pomocí modelových látek obsahujících fosfátovou skupinu (nukleotidů) byl studován vliv pH, typ a koncentrace použitého pufru a koncentrace použitého ligandu na výslednou separaci. Pro vybrané komplexy ligand-nukleotid byly také stanoveny konstanty stability.

Tato práce byla podpořena grantem 15-01948S Grantové agentury České republiky.

1Po14

ELEKTROCHEMICKÉ VYLUČOVANIE STRIEBORNÉHO AMALGÁMU NA ELEKTRODÁCH Z PYROLYTICKÉHO UHLÍKU

Peter Šebest¹, Pavlína Vidláková¹, Filip Ligmajer^{1,2,3}, Aleš Daňhel¹

¹ Biofyzikální ústav, Akademie věd České republiky, v.v.i., Královopolská 135, 612 65 Brno, Česká republika

² Central European Institute of Technology, Vysoké učení technické v Brně, Technická 10, 616 00 Brno, Česká republika

³ Ústav fyzikálního inženýrství, Vysoké učení technické v Brně, Technická 2, 616 69 Brno, Česká republika
besta@ibp.cz

Ortuť predstavuje jedinečný elektródový materiál s neporovnateľnými výhodami ako je vodivosť, tekutý stav, ideálne hladký a obnoviteľný povrch a vysoké prepätie vodíka. Vďaka týmto vlastnostiam našla ortuťová elektróda uplatnenie v elektroanalýze širokého spektra látok [1,2]. Napriek tomu nízka mechanická stabilita ortuti bráni jej využitiu ako biosensoru. Strieborný amalgám predstavuje vhodný alternatívny elektródový materiál k ortuti s elektrochemickými vlastnosťami veľmi podobnými ortuťovej elektróde [3].

Elektróda z pyrolitického uhlíku v basalnej i edge orientácii bola použitá pre sledovanie elektrochemického chovania Ag^+ a Hg^{2+} iónov a ich zmesi vo zvolených pomeroch v roztoku elektrolytu 0.1M dusičnanu draselného pomocou cyklickej voltametrie. Katodický a anodický pík u striebra sa objavil pri -400 mV a +210 mV a u ortuti to bolo pri -300 mV a +200 mV. V oboch prípadoch sme pozorovali potenciálový posun približne o 200 mV k pozitívnejšiemu potenciálu medzi prvým a druhým scanom. Na oboch typoch povrchov boli elektrochemicky vylúčené mikročastice strieborného amalgámu, ktoré boli charakterizované pomocou SEM-XRD.

Kontrolované vylučovanie strieborných amalgámových mikročastíc na povrch pyrolitického uhlíku (alebo iného materiálu) predstavuje novú metódu prípravy nových materiálov k elektrochemickej detekcii a taktiež k príprave mikroelektrod či poľa mikroelektrod.

Tato práce vznikla za finančnej podpory Grantovej agentúry Českej republiky (projekt 17-23634Y).

- [1] M. Fojta, F. Jelen, L. Havran, E. Palecek, Electrochemical stripping techniques in analysis of nucleic acids and their constituents, *Curr. Anal. Chem.*, 4 (2008) 250-262.
- [2] E. Palecek, M. Trefulka, Electrocatalytic detection of polysaccharides at picomolar concentrations, *Analyst*, 136 (2011) 321-326.
- [3] A. Danhel, J. Barek, Solid amalgam electrodes in organic electrochemistry, *Curr. Org. Chem.*, 15 (2011) 2957-2969.

1Po15

FLOW TECHNIQUES - TOOL FOR RESEARCH IN PHARMACEUTICAL AREA

Petr Solich, Hana Sklenářová, Petr Chocholouš

*Laboratory of Flow Analysis, Faculty of Pharmacy, Charles University, Al. Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, Czech Republic
solich@faf.cuni.cz*

Different flow techniques (FIA, SIA, SIC, MSA, LOV, etc.) are already well established analytical methods, which are characterised by several factors essential for research or routine analysis, e.g. simplicity of fundamental principles, inexpensive instrumentation, low sample consumption and short analysis time. All flow methods offer several advantages, mainly the instrumental set-up is very flexible and the hydrodynamic variables are easily controlled, thus flow methods are becoming a convenient research tool for pharmaceutical area [1].

Automated flow analytical methods has been recently used as a simple sample preparation step (automation of various extraction techniques) or for long-term monitoring. Flow techniques can automate the analysis and control long-term measurements such as dissolution, liberation or permeation tests of pharmaceuticals. A fully automated system based on the SIA technique connected to the *Franz cell* (enables to mimic real conditions in the human skin and penetration of the drug through the dermal barrier) can easily monitor on-line the release rate of pharmaceuticals [2].

Sequential injection chromatography (SIC) was firstly introduced in 2003 as a simple alternative of high performance liquid chromatography (HPLC) for fast analysis of relatively simple samples. Implementation of short monolithic chromatographic column into SIA has expanded also to analysis of pharmaceuticals [3].

The authors gratefully acknowledge the financial support of Grant Agency of the Czech Republic (GAČR), project No. 15-10781S and by the project

STARSS (Reg. No. CZ.02.1.01/0.0/0.0/15_003/0000465) co-funded by ERDF.

- [1] I. Šrámková, C.G. Amorim, H. Sklenářová, M.C.M.B. Montenegro, B. Horskotte, A.N. Araujo, P. Solich, *Talanta* 118 (2014) 104.
- [2] L. Zelená, S.S. Marques, M. Segundo, M. Miro, P. Pávek, H. Sklenářová, P. Solich, *Anal. Bioanal. Chem.* 408 (2016) 971.
- [3] A.D. Batista, P. Chocholouš, D. Šatinský, P. Solich, F.R.P. Rocha, *Talanta* 133 (2015) 142.

1Po16

KARBAMÁTY JAKO ÚČINNÉ INHIBITORY CHOLINESTERÁZ

Šárka Štěpánková¹, Katarína Vorčáková¹

¹ *Katedra biologických a biochemických věd, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice*

Cholinesterázy představují skupinu enzymů, které hydrolyzují cholinové estery a hrají klíčovou roli v řadě důležitých oblastí, jako je např. neurologie, toxikologie, farmakologie. Do této skupiny enzymů patří dva enzymy – acetylcholinesteráza (AChE) a butyrylcholinesteráza (BChE). AChE odbourává neurotransmitter cholinergního nervového systému - acetylcholin. Zvýšená aktivita AChE může způsobovat poruchy v přenosu nervových impulsů v cholinergním nervovém systému v důsledku sníženého množství acetylcholinu schopného vazby na cholinergní receptory a je pravděpodobně jednou z příčin rozvoje Alzheimerovy choroby. V pozdějších stádiích Alzheimerovy choroby je aktivita AChE snížena a její funkci zastává BChE [1, 2].

Cholinesterázy mohou být inhibovány působením různých látek. Některé z nich se využívají jako léčiva (např. pro léčbu Alzheimerovy choroby, myasthenie gravis nebo glaukomu), další se uplatňují v zemědělství nebo vojenské oblasti.

Cílem této práce bylo nalézt vhodné inhibitory cholinesteráz. Jako potenciální inhibitory byly testovány karbamátové deriváty. Inhibiční účinnost testovaných látek byla charakterizována hodnotou IC₅₀, která byla stanovena modifikovanou Ellmanovou spektrofotometrickou metodou [3]. Získané výsledky byly porovnány s hodnotami IC₅₀ běžně používaného léčiva Alzheimerovy choroby – rivastigminu. Lipofilita testovaných látek (důležitá pro přestup potenciálního léčiva přes hematoencefalickou bariéru) byla hodnocena na základě

rozdělovacího koeficientu v systému *n*-oktanol/voda (log *P*).

Bylo prokázáno, že testované látky jsou účinnými inhibitory cholinesteráz.

- [1] Miao Y., He N., Zhu J.-J.: History and new developments of assays for cholinesterase activity and inhibition. *Chem Rev.* 2010;110(9):5216–34.
- [2] Onor M.L., Trevisiol M., Aguglia E.: Rivastigmine in the treatment of Alzheimer's disease: an update. *Clin Interv Aging*, 2007, 2(1), 17-32.
- [3] Horáková E., Drabina P., Brož B., Štěpánková Š., Vorčáková K., Královce K., Havelík R., Sedlák M.: Synthesis, characterization and in vitro evaluation of substituted *N*-(2-phenylcyclopropyl)carbamates as acetyl- and butyrylcholinesterase inhibitors. *J Enzyme Inhib Med Chem*, 2016; 31(S3): 173-179.

1Po17

STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF TWO INTERMEDIATE BIOSYNTHETIC PRODUCTS OF ANGUCYCLINE ANTIBIOTIC AURICIN FROM STREPTOMYCES AUREOFACIENS CCM 3239

Iveta Uhliariková¹, Mária Matulová¹, Vladimír Pätoprstý¹, Ján Kormanec²

¹Slovak Academy of Sciences, Institute of Chemistry, Dubravská cesta 9, 845 38 Bratislava, chemivuh@savba.sk

²Slovak Academy of Sciences, Institute of Molecular Biology, Dubravská cesta 21, 845 51 Bratislava

The soil bacteria streptomycetes are the main producers of bioactive natural products including many antibiotics, antitumor, antiviral, and antifungal compounds. Many of them belong to polyketides. They are structurally diverse natural compounds synthesized by a repeated decarboxylative condensation from acyl-CoA precursors by a polyketide synthase (PKS). Aromatic polyketides are synthesized by type II PKSs, which comprise three essential subunits (KS, CLF, ACP) and further subunits (KR, ARO, CYC) involved in modification of the nascent polyketide chain. Various tailoring reactions catalysed by diverse oxygenases, reductases, methylases, and glycosyltransferases produce a final bioactive polyketide [1]. Type II PKS gene cluster in *Streptomyces aureofaciens* CCM3239 is responsible for production of angucycline polyketide antibiotic auricin, conjugated with D-forosamine [2]. Sequence analysis of the complete gene cluster, including the flanking

regions, revealed an unusual organisation of auricin biosynthetic genes [3]. Two genes, *sa10*, encoding homologue of hydroxyacyl-CoA dehydrogenase, and *sa48*, encoding aromatic polyketide cyclase/dehydratase, were deleted in *S. aureofaciens* CCM 3239. Phenotypic analysis of the mutants revealed their crucial role in auricin biosynthesis. No auricin was produced by both mutants. Instead, new compounds, yellow inactive SA10, and yellow active SA48 were produced. The structural analysis of these compounds were characterised by HR MS analysis and NMR.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contracts No. APVV-15-0410.

- [1] Hertweck, C. et al.: Nat. Prod. Rep. 24 (2007) 162-190.
- [2] Kutas, P. et al.: Appl. Microbiol. Biotechnol. 97 (2013) 2413-2421.
- [3] Kormanec, J. et al.: Appl. Microbiol. Biotechnol. 98 (2014) 45-50.

1Po18

BIOLOGICAL ACTIVITY, STRUCTURAL CHARACTERIZATION AND CRYSTAL PACKING OF THE INDOLIZINE DERIVATIVES

Viktor Vrabel¹, Július Sivý², Peter Šafař³, Štefan Marchalín³

¹Institute of Analytical Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, Bratislava, SK-81237, Slovak Republic, viktor.vrabel@stuba.sk,

²Institute of Mathematics and Physics, Faculty of Mechanical Engineering, Slovak University of Technology, Námetie slobody 17, SK-81231 Bratislava, Slovak Republic,

³Institute of Organic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, Bratislava, SK-81237, Slovak Republic

Heterocycles are involved in a wide range of biologically important chemical reactions in living organisms. One group of heterocycles, indolizines, has received much scientific attention during the recent years. Indolizines are electron-rich heterocycles with very low oxidation potential. Functionalized indolizines are common substructures found in biologically important natural products and synthetic pharmaceuticals.

Indolizidines with different degrees of unsaturation are part of the skeleton of numerous natural compounds found in a large number of

plants, animals, bacteria, and fungi. They occupy an important and privileged position in modern organic chemistry, because of their wide spectrum of biological activity. For example, polyhydroxylated indolizidine alkaloids represented by the so popular castanospermine and swainsonine are well known for their ability to function as excellent inhibitors of biologically important pathways. These include the binding and processing of glycoproteins, potent glycosidase inhibitory activities activity against AIDS virus HIV and some carcinogenic cells as well as against other important pathologies [1, 2].

Due to the diverse properties of indolizine derivatives, the crystal and molecular structure of the compounds (5*S*,8*aS*,9*S*)-9-hydroxy-5-methyl-4,6,7,8,8*a*,9-hexahydrothieno-[3,2-*f*] indolizin-5-ium iodide (**1**) (Fig. 1) and (5*S*,8*aS*)-5-methyl-4,6,7,8,8*a*,9-hexahydrothieno-[3,2-*f*] indolizinium iodide (**2**), have been determined as part of our study of the conformational changes caused by different substituents at various positions on the indolizine ring system.

In both compounds, the central six-membered ring of the indolizine moiety and the pyrrolidine ring are not planar and adopt a half-chair and an envelope conformation. Intermolecular O–H...I, C–H...I and C–H...O hydrogen bonds link molecules into extended and infinite **C(4)** [3] zigzag chains along the *b* axis and help to stabilize the crystal structure.

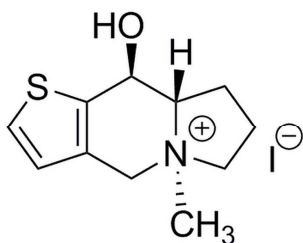


Fig. 1. The molecular structure of the compound (**1**).

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency (APVV-0797-11 and APVV 0204-10) and the Grant Agency of the Slovak Republic (VEGA 1/0873/15 and VEGA 1/0371/16). This contribution is also the result of the project: Research Center for Industrial Synthesis of Drugs, ITMS 26240220061, supported by the Research & Development Operational Programme funded by the ERDF. The authors thank the Structural Funds, Interreg IIIA, for financial support in purchasing the diffractometer.

- [1] Compain, P., Martin, O. R.: *Bioorg. Med. Chem.* **9**, 3077–3092, (2001)
- [2] Melo, E.B., Gomes, A., Carvalho, I.: *Tetrahedron* **62**, 10277–10302, (2006)
- [3] Bernstein, J., Davis, R. E., Shimoni, L., Chang, N.-L.: *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **34**, 1555–1573, (1995)

1Po19

ŠTÚDIUM ANALYTICKÝCH VLASTNOSTÍ LIEČIVA AMPRÓLIUM A JEHO STANOVENIE V KRMIVÁCH

Jozef Sokol, Mária Maliarová, Katarína Kulichová

^a Univerzita sv. Cyrila a Metóda, Fakulta prírodných vied v Trnave, J. Herdu 2, 917 01 Trnava
jozef.sokol@ucm.sk

Amprolium hydrochlorid (AMP) je liečivo, ktoré sa používa ako preventívne a terapeutické liečivo proti kokcidiám u hydiny. AMP pôsobí najmä v gastrointestinálnom trakte, ale môže sa vstrebávať a tým prechádzať do iných orgánov a uchovávať aj vo vajciach. Preto je nevyhnutné sledovať potraviny tohto druhu na rezídua.

Vysokoúčinná kvapalinová chromatografia (HPLC) je metóda, ktorá sa v súčasnosti najviac využíva za účelom potvrdenia prítomnosti reziduí liečiv v rôznych potravinových matriciach. Bola použitá aj pri štúdiu analytických vlastností a stanovení tohto liečiva. Na HPLC analýzu amprólia boli odskúšané dve kolóny, s fázou C18 a HILLIC kolóna. Pre lepšie analytické vlastnosti HILLIC kolóny sa separácia vykonávala na tejto kolóne a pokračovalo sa v optimalizácii chromatografických a analytických podmienok. Analýza prebiehala v izokratickom systéme mobilných fáz. Zložku A mobilnej fázy tvorila kyselina mravčia 0,05 mol.L⁻¹ s upraveným pH na 4,5. Zložkou B bol acetonitril. Zloženie mobilnej fázy nám ukázalo, že AMP sa začal zadržiavať na kolóne, keď zložka A mobilnej fázy bola 30% a menej. Boli stanovené nasledovné validačné parametre, ako limit detekcie *LOD* a limit kvantifikácie *LOQ*. Limit detekcie *LOD* mal hodnotu 0,014 µg/mL a limit kvantifikácie *LOQ* mal v našom prípade hodnotu 0,046 µg/mL. Na extrakciu bol odskúšaný metanol a acetonitril. Acetonitril vykazoval vyššie výťažnosti než metanol. Boli analyzované aj vzorky kŕmnych zmesí, ale amprolium nebolo potvrdené.

Podporené grantom Vega 1/0919/17.

POSTERY - SEKCIA 2 FYZIKÁLNA CHÉMIA

2Po01

ELECTROCHEMISTRY AND SPECTROCHEMISTRY OF TRIGONAL- BIPYRAMIDAL MANGANESE(III) COMPLEX WITH A SALEN TYPE LIGAND

Denisa Darvasiová¹, Peter Raptá¹, Lukáš Bučinský¹,
Martin Breza¹, Vladimír B. Arion²

¹Department of Physical Chemistry, Slovak University
of Technology, Radlinského 9, 81237 Bratislava,
Slovak Republic

denisa.darvasiova@stuba.sk

²Institute of Inorganic Chemistry of the University of
Vienna, Währinger Strasse 42, A1090 Vienna, Austria

Recently, we reported on salen-type Schiff bases, where the formation of a 12-membered central chelate ring was confirmed, in which the tetramethyldisiloxane unit separates the aliphatic chains reducing markedly the mechanical strain in the chelate ring. The complex of our interest $[\text{MnL}(\text{NCS})]\cdot 0.4\text{H}_2\text{O}$ (**1**) was prepared by reaction of previously synthesized complex $[\text{MnL}(\text{OAc})]\cdot 0.15\text{H}_2\text{O}$ [**1**] with KSCN in methanol. This trigonal-bipyramidal complex was characterised by routine spectroscopic techniques (IR and UV-vis), ESI mass spectrometry, and single crystal X-ray diffraction, as well as by spectroelectrochemistry, HFEPR, theoretical DFT and ab initio CASSCF calculations [2].

The redox properties of complex **1** were investigated by cyclic voltammetry and spectroelectrochemistry. The rich electrochemical response was observed with three irreversible or quasi-reversible oxidation waves and one broad irreversible reduction wave. In situ UV-vis-NIR spectroelectrochemical experiments revealed that by decreasing the scan rate, the cathodic reduction becomes more electrochemically reversible confirming the slow electron transfer and almost full recovery of the initial optical bands during the voltammetric reverse scan was observed. Upon anodic oxidation of **1** in the region of the first oxidation peak analogous behaviour was observed with the partial recovery of the initial optical bands during the voltammetric reverse scan.

This contribution was supported by the Science and Technology Assistance Agency under the contract

No. APVV-15-0053 and by the Slovak Grant Agency VEGA under contract No. 1/0416/17.

- [1] Cazacu M., Shova S., Soroceanu A., Machata P., Bucinsky L., Breza M., Raptá P., Telser J., Krzystek J., Arion V. B. Charge and Spin States in Schiff Base Metal Complexes with a Disiloxane Unit Exhibiting a Strong Noninnocent Ligand Character: Synthesis, Structure, Spectroelectrochemistry, and Theoretical Calculations. *Inorganic Chemistry*, 2015, 54, 5691–5706.
- [2] Shova S., Vlad A., Cazacu M., Krzystek J., Bucinsky L., Breza M., Darvasiová D., Raptá P., Cano J., Telser J., Arion V. B. A trigonal-bipyramidal manganese(III) complex of a salen type ligand with a positive axial anisotropy parameter *D*. Submitted to Dalton Transactions.

2Po02

FOREZNÁ KONCEPCIA HMOTNOSTNEJ SPEKTROMETRIE SEKUNDÁRNYCH IÓNOV PRI VYTVÁRANÍ DATABÁZY AUTOLAKOV

¹Lea Hegedúsová, ^{1,2}Monika Jerigová, ^{1,2}Dušan Velič

¹Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta,
Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie,
Mlynská dolina, 842 15 Bratislava
leahegedusova@gmail.com

²Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3,
841 04 Bratislava

Forezná chémia je popri iných forezných vedách súčasťou celkovej forenznej analýzy. Jej úlohou je plejádov experimentov poskytovať dôkazy pre súdne konanie, pričom využíva poznatky a metódy analytickej, fyzikálnej, organickej, anorganickej chémie i biochémie. [1]

Práca sa zameriava na skúmanie zloženia lakov na karosérii automobilov pomocou hmotnostnej spektrometrie sekundárnych iónov. Cieľom práce je zistiť chemické zloženie laku dvoch rôznych vzoriek a porovnať ich. Perspektívne zameranie je na porovnanie zloženia jednotlivých typov autolakov na rôznych automobiloch a na základe týchto poznatkov vytvoriť databázu pre uľahčenie poskytovania dôkazového materiálu. Hmotnostná spektrometria sekundárnych iónov (Secondary Ion Mass Spectrometry, SIMS) je fyzikálno-chemická metóda, využívaná na analýzu chemického zloženia rôznych materiálov. Jej princípom je bombardovanie povrchu materiálu primárnymi iónmi, ktoré prenikajú materiálom a svoju kinetickú energiu prenášajú na zasiahnuté atómy a molekuly, čím vytvárajú kolízu kaskádu. Odprášené sekundárne ióny sa

analyzujú v detektore na princípe doby letu iónov. [2] Skúmané boli vzorky svetločerveného a tmavočerveného laku áut. Na týchto vzorkách boli odmerané hmotnostné spektrá v pozitívnej aj v negatívnej polarite. Na vrchnej vrstve autolaku boli pozorované spektrálne rozdiely a to najmä v píkoch C^+ , CF^+ , Si^+ , Al^+ a F^- . Rozdiely intenzít charakteristických píkov udávaných v countoch boli vo výške jednej až troch dekad. Za najzásadnejšie zistenia teda zatiaľ možno považovať rozdiely v obsahu uhlovodíkov, fluórovaných zlúčenín a látok obsahujúcich kremík a hliník. Všetky spomenuté látky sú vo vyššej miere zastúpené v type svetločerveného laku.

- [1] L. Slušná (2013) Forenzné stopy strelivín na odtlačkoch prstov v hmotnostných spektrách (bakalárska práca) Univerzita Komenského v Bratislave
 [2] M. Aranyosiová (2006) ChemZi, 2(2), p.52.

2Po03

EPR CHARACTERISATION OF COPPER(II) THIOSEMICARBAZONE COMPLEXES

Michal Hricovíni¹, Milan Mazúr¹, Vlasta Brezová¹, Vladimír B. Arion²

¹Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava, Slovak Republic

²Institute of Inorganic Chemistry, University of Vienna, Währinger Strasse 42, A-1090 Vienna, Austria

Keywords: copper complexes, thiosemicarbazones, reactive oxygen species, EPR Thiosemicarbazones (TSCs) represent compounds possessing a wide range of biological activities and are well-known for their broad-spectrum antibiotic activity [1]. Coordination of TSCs to biologically-relevant metal ions has a strong impact on their biological activity and can lead to the generation of reactive oxygen species (ROS) [2]. Our investigations were focused on EPR study of water-soluble Cu(II) complexes with TSCs containing different substitution at the terminal nitrogen atom and on their ability to produce ROS in the presence of hydrogen peroxide or upon UVA irradiation.

The X- and Q-band EPR spectra of polycrystalline samples revealed close similarity for Cu(II) complexes containing ligand with hydrogen, methyl or ethyl group corresponding to axial symmetry of Cu(II) ion. The spin-trapping

technique was applied for the detection of ROS generated upon photoexcitation of Cu(II) complexes and phenyl-containing ligand in the aerated solutions. The photoinduced formation of corresponding spin-adducts was fully suppressed for all complexes, despite upon UVA exposure of pristine ligand spin-adduct of superoxide radical anion was detected in dimethylsulfoxide. The addition of H_2O_2 into aerated aqueous solutions of complexes led to the formation of $\bullet OH$ spin-adduct, suggesting the generation of hydroxyl radicals via Fenton-like mechanism [3].

Acknowledgements: This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-15-0053 and by the Scientific Grant Agency of the Slovak Republic (VEGA Project 1/0041/15).

- [1] S. Abora, S. Agrawal, S. Singhal, *Int. J. Pharm. Pharm. Sci.* 6 (2014) 34-41.
 [2] A. Sirbu, O. Palamarcu, M. V. Babak, J. M. Lim, K. Ohui, E.A., Enyedy, S. Shova, D. Darvasiová, P. Raptá, W. H. Ang, V. B. Arion, *Dalton Trans.* 46 (2017) 3833-3847.
 [3] A. Pham, G. Xing, C. Miller, T. Waite, *J. Catal.* 301 (2013) 54-64.

2Po04

THEORETICAL AND EXPERIMENTAL ANALYSIS OF HEPARIN PENTASACCHARIDE

Miloš Hricovíni

Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Bratislava, Slovakia
 hricovini@savba.sk

Theoretical analysis of the heparin-pentasaccharide, representing heparin binding site to plasma protein antithrombin III, enabled detailed information on the 3D molecular structure of this pentasaccharide in aqueous solution. Apart from the structural data, DFT calculation, using the B3LYP functional and the 6-311+G(d,p) basis set combined with explicit solvent model, provided NMR data as well. Detailed analysis of Fermi-contact contributions to $^3J_{H-C-C-H}$ indicated that this mechanism is dominant for most spin-spin coupling constants, however, the contributions of paramagnetic (PSO) and diamagnetic (DSO) spin-orbit contributions were comparable to the Fermi terms for some coupling constants in the iduronic acid residue in this pentasaccharide [1]. Theoretical NMR data well agreed with the experimental proton-proton and proton-carbon

spin-spin coupling constants, the latter obtained by the modified gradient-selected high-resolution 2D HMBC pulse sequence. The DFT-computed three-bond proton-proton coupling constants also showed that the best agreement with experiment was obtained with a weighted average of 15:85 (1C4:2S0) of the sulfated iduronic acid forms indicating that the ratio is even more shifted towards the 2S0 form than formerly assumed.

This work was supported by the Scientific Grant Agency of the Slovak Republic (VEGA 2/0100/14).

[1] Miloš Hricovíni: J. Phys. Chem B. 119 (2015) 12397-12409.

2Po05

STUDIUM HYDROFOBICITY VYBRANÝCH FLAVONOLIGNANŮ METODOU VYSOKOÚČINNÉ KAPALINOVÉ CHROMATOGRAFIE

Pavel Kosina¹, Alena Rajnochová Svobodová¹, Jitka Vostálová¹, David Biedermann², Jitka Ulrichová¹

¹Ústav lékařské chemie a biochemie, Lékařská fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Hněvotínská 3, 775 15 Olomou

pavel.kosina@upol.cz

²Laboratoř biotransformací, Mikrobiologický ústav, AV ČR, Vítězská 108, 142 20 Praha 4 - Krč

Ostropestřec mariánský (*Silybum marianum*) patří mezi uznávané léčivé rostliny. Silymarin, standardizovaný extrakt ze semen *S. marianum*, obsahuje jako aktivní složku celou řadu polyfenolů. Pro stanovení hydrofobicity (rozdělovací koeficient log P) při různém pH (4,5-8,5) nebylo využito klasického systému n-oktanol/vodná fáze, ale metody HPLC s gradientovou elucí studovaných látek na C₁₈ koloně v systému fosfátový pufr o určitém pH/methanol porovnáváním retenčních časů studovaných a referenčních látek o známé hodnotě log P (0,9-3,6) [1]. Tento přístup dovoluje určit log P i pro jednotlivé diastereomery látek ze směsi po jejich chromatografické separaci, což metoda n-oktanol/voda neumožňuje. Log P byl studován u silybinu, silychristinu, isosilybinu, taxifolinu, kvercetin, silydianinu, dehydrosilybinu, dehydrosilychristinu, dehydrosilydianinu a dehydroisosilybinu. U všech zmíněných látek docházelo s rostoucím pH ke snižování hodnoty log P, což je v souladu s rostoucí ionizací molekul v prostředí s vyšším pH. Nejnížší hodnoty log P vykazoval taxifolin, následován silychristinem, silydianinem, dehydro-

silydianinem, dále silybinem a kvercetinem, isosilybinem a dehydrosilychristinem. Nejvyšší hydrofobicitu ze studovaných látek vykazoval dehydrosilybin a dehydroisosilybin. Změny hydrofobicity v závislosti na pH prostředí u jednotlivých studovaných látek budou dále použity pro korelace chování a účinků těchto látek v modelových a biologických systémech za konkrétních experimentálních podmínek.

Autoři děkují za finanční podporu grantu GACR 15-10897S.

[1] OECD Guidelines for the Testing of Chemicals, Section 1, Physical-Chemical properties, Test No. 117: Partition Coefficient (n-octanol/water), HPLC Method, 23 Nov 2004.

2Po06

ABSORPČNÁ SPEKTROSKOPIA FENOKOLOVÝCH ŽIVÍC

Eva Noskovičová¹, Dušan Lorenc^{1,2} a Dušan Velič^{1,2}

¹Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Univerzita Komenského, Bratislava

²Medzinárodné laserové centrum, Bratislava

Rôzne typy fenokolových živíc a alkalického roztoku lignínu boli charakterizované absorpčnou spektroskopiou v ultrafialovej a viditeľnej oblasti spektra. Lignín je popri celulóze najdôležitejšia zložka dreva. Spôsobuje tzv. zdrevnatenie bunkových stien a plní stavebnú a ochrannú funkciu v niektorých rastlinách. Z chemického hľadiska je lignín polyfenolická zlúčenina, ktorá nemá presne definovanú štruktúru. Fenokolové živice je možné pripraviť polykondenzáciou fenolu a formaldehydu. Používajú sa na výrobu plastov a lepidiel. Pridávaním lignínu ako sušiny do fenokolových živíc sa môžu zlepšiť vlastnosti týchto živíc. [1,2]

Absorpčné spektrá boli namerané pre roztok alkalického lignínu. Ďalej boli namerané absorpčné spektrá fenokolových živíc do ktorých bola pridaná sušina v rôznych množstvách. Namerané spektrá obsahovali absorbný pík, prislúchajúci fenolátovej skupine, ktorá vznikla z fenolickej skupiny pôsobením silnej zásady. Absorpčné maximum pre fenolátovú skupinu v ligníne a fenokových živiciach bolo zaznamenané pri vlnovej dĺžke 280 nm.

Tento článok vznikol vďaka podpore projektu APVV-15-0201.

[1] J. da S. Coelho-Moreira et. al., *Herbicides-Advances in Research* 165 (2013).

[2] F. S. Chakar et. al., *Industrial Crops and Products* 20.2, 131 (2004).

2Po07

NEKATALYZOVANÝ BROMIČNANOVÝ OSCILÁTOR S 8-HYDROXYCHINOLÍNOM AKO SUBSTRÁTOM

Marek Pribus¹, Ivan Valent¹

¹Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie,
Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského,
Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava,
marek.pribus@gmail.com

Nekatalyzovaný bromičnanový oscilátor^[1] je dôležitou modifikáciou klasickej Belousovej-Zabotinského oscilačnej reakcie. Reakčná zmes obsahuje podobne ako v Belousovej-Zabotinského reakcii organický substrát, bromičnanové anióny a oxóniové kationy. Prítomnosť oxidačno-redukčného katalyzátora v tomto prípade nie je potrebná, pretože jeho funkciu v systéme preberá samotný organický substrát.

V súčasnosti poznáme len niekoľko substrátov (fenol, anilín a ich rôzne deriváty s aspoň jednou neblokovanou *orto*-, respektíve *para*- polohou vzhľadom na hydroxylovú skupinu, prípadne aminoskupinu) vhodných pre nekatalyzovaný bromičnanový oscilátor.^[2] Celkový detailný mechanizmus tejto komplexnej reakcie nie je doteraz celkom objasnený, aj keď sa už podarilo identifikovať veľké množstvo rôznych medziproduktov a produktov.

8-hydroxychinolín bol ako substrát nekatalyzovaného bromičnanového oscilátora objavený už v 80-tych rokoch minulého storočia.^[3] Autori v uvedenej práci určili koncentračné podmienky, pri ktorých systém vykazuje chemické oscilácie, ktoré sú však neperiodické. Nám sa podarilo objaviť také koncentračné podmienky, pri ktorých sú oscilácie periodické s pomerne krátkou oscilačnou periódou. Určili sme koncentrácie jednotlivých reaktantov, pri ktorých systém vykazuje oscilačné správanie.

V ďalšom výskume chceme sledovať túto reakciu v koloidných systémoch vrstevnatých kremičitanov, so zámerom sledovania vplyvu koloidných častíc na priebeh reakcie, keďže 8-hydroxychinolín môže vytvárať koordinačné zlúčeniny s hliníkom na hranách koloidných častíc.

Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA 1/0278/16.

[1] Kunhert L. Linde H.: *Z. Chem.*, **17**, 19 (1977)

[2] Orbán M., Körös E.: *J. Phys. Chem.*, **82**, 14 (1978)

[3] Nair P. K. R., Mittal A., K. Srinivasulu K.: *Z. Physik. Chem.*, **261**, 799 (1980)

2Po08

VYUŽITÍ METOD RTUŤOVÉ POROZIMETRIE A FYZIKÁLNÍ SORPCE DUSÍKU PRO CHARAKTERIZACI PÓROVÉHO PROSTORU VYBRANÝCH PÍSKOVČŮ

Lucie Ruppenthalová¹, Martin Vavro¹

¹Ústav geoniky AV ČR, v.v.i., Studentská 1768, 708 00
Ostrava, Česká republika,
lucie.ruppenthalova@ugn.cas.cz

Porozita, zvláště distribuce pórů a celkový charakter pórového prostoru hornin jsou jedním z faktorů určujících odolnost hornin vůči zvětrávání. Pro tuto charakterizaci hornin je nejčastěji používána rtuťová porozimetrie, nicméně i ta má svá omezení. V tomto příspěvku byla charakterizace doplněna o metodu fyzikální sorpce dusíku při 77 K. Studium pórového prostoru proběhlo na dvou typech přírodních pískovců (Podhorní Újezd a Javorka) a alkalicky aktivovaného umělého pískovce.

Oba typy přírodních pískovců jsou především makroporézní materiály, což dokazuje Hg porozimetrie, s menším zastoupením mezopórů. Dle IUPAC odpovídá charakter adsorpčních izoterm, naměřených pomocí sorpce dusíku, mezoporézním materiálům, nicméně v tomto případě ukazuje na málo rozvinutý porézní systém (v daném měřicím rozsahu). Charakter hysterezních smyček je typický pro neuspořádané lamelární pórové struktury, případně šterbinové póry.

Nejrozvinutější porézní prostor vykazuje v porovnání s přírodními pískovci umělý pískovec, který má značně rozvinutou oblast mezopórů. Toto zjištění je i potvrzeno rtuťovou porozimetrií. Charakter adsorpčních izoterm odpovídá rovněž mezoporézním materiálům a tvar hysterezní smyčky je charakteristický pro cylindrické póry.

Výsledky ze rtuťové porozimetrie ukazují jednoznačně na makroporézní charakter pískovců, nicméně při detailnějším studiu se ukazuje, že významnou roli při interakci pískovců s prostředím mohou hrát i mezopóry pod 50 nm, které lze lépe definovat pomocí metody fyzikální sorpce dusíku.

Příspěvek vznikl za podpory projektu MŠMT Institut čistých technologií těžby a užití energetických surovin – projekt udržitelnosti (NPU I - LO1406), projektu RINGEN+, reg. no. CZ.02.1.01/0.0/0.0/16_013/0001792 OP VVV a

projektu podpory dlhodobého koncepčného rozvoje výzkumných organizací (RVO: 68145535).

2Po09

NANOMATERIALS AND THEIR TOXICITY

Peter Šimon, Tibor Dubaj, Zuzana Cibulková, Anna Vykydalová

Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia
peter.simon@stuba.sk

Nanoparticles (NPs), that are characterized by the size range of up to 100 nm, may be toxic even though the corresponding bulk material can be safe. The first reason for the toxicity of nanoparticles is their dimension – they are so small that they easily enter the body through the alveolas in the lungs when inhaled, through pores in the gut when ingested or through the pores in the skin. Due to their small dimension, NPs can enter such parts of the body where the counterpart bulk materials cannot occur. If the nanomaterials are biopersistent, they can accumulate in various organs. The second reason for their toxicity is their great surface energy due to unsatisfied chemical bonds at their surface which brings about their strong interaction with the surrounding biological matrix [1].

Within the project HISENTS, the sensor platform for nanotoxicity is developed. The platform will include DNA, miRNA, biomembrane, single cell, lung, intestine, liver, kidney and placenta modules. Toxicity of nanoparticles is related to their concentration in the organ under consideration and time of exposure. Both, the concentration and exposure time, can be estimated from physiologically based pharmacokinetic (PBPK) modeling [2]. The PBPK model enables to describe the ADME (absorption, distribution, metabolism, excretion) process and, hence, to predict the concentration of NPs in the organs and time of exposure. Kinetic and thermodynamic parameters needed for modeling will be obtained from the sensor response. Knowing the concentration and time of exposure, the type of toxicity and damage of cells will be assessed.

Acknowledgement. This work is financed by the project No. H2020-NMP-685817 High level Integrated SEnsor for NanoToxicity Screening (HISENTS).

[1] P. Šimon, E. Joner, J. Food Nutr. Res. 47 (2008) 51-59

[2] M. Li, K.T. Al-Jamal, K. Kostarelos, J. Reineke, ACS Nano, 4 (2010) 6303-6317.

2Po10

FLUORESCENČNÁ CHARAKTERIZÁCIA LIGNÍNU A FENOKOLOVÝCH ŽIVÍC

Lenka Slušná¹, Dušan Velič^{1,2}

¹*Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava*
slusnal@gmail.com

²*Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 842 15 Bratislava*

Fenolformaldehydové živice sú syntetické polyméry, vyrábané reakciou fenolu s formaldehydom za prítomnosti kyslého alebo zásaditého katalyzátora. Obsah fenolu v živiciach je 20 %. Potreba zníženia spotreby fosílnych zdrojov, vedie k zmene pri výrobe fenolických živíc a použitiu alternatívnych surovín z obnoviteľných zdrojov. Jedným z riešení je čiastočná náhrada fenolu lignínom. Lignín je makromolekula, ktorá obsahuje zložky blízke fenolformaldehydovým oligomérom. Kvôli jeho zložitej štruktúre a teda nízkej reaktivite, je náročné jeho zapracovanie do reťazca živice. Fluorescenčnou spektroskopiou boli charakterizované alkalické roztoky fenokolových živíc a lignínu, pomocou spektrometra Fluorolog 3-11 ISA/Jobin Yvon –Spex. Lignín je zmes lignínu a hydroxidu sodného. Roztoky fenokolových živíc sú zmesami lignínu s hydroxidom sodným, formaldehydom a fenolom. Fluorescenčné maximum lignínu sa nachádza pri 420 nm a fenokolových živíc pri 440 nm a 475 nm. Posuntie fluorescenčných maxím fenokolových živíc k vyšším vlnovým dĺžkam (nižším energiám) sú spôsobené prídavkom čistého fenolu k alkalickým roztokom lignínu.

Táto práca vznikla vďaka finančnej podpore grantu APVV-15-0201.

[1] Lichtman, Jeff W., José-Angel Conchello. *Nature methods* 2.12 2005: 910-919.

[2] Lakowicz, Joseph R. "Fluorescence anisotropy. Springer US 1999: 291-319.

POSTERY - SEKCIA 3 NANOMATERIÁLOVÁ CHÉMIA

3Po01

METODIKA VERIFIKACE MULTIMODÁLNI KONTRASTNÍ LÁTKY NA BÁZI MAGNETICKÝCH NANOČÁSTIC PRO ZOBRAZOVACÍ MODALITY MPI- MRI-FLUORESCENCE

Pavla Francová¹, Kateřina Poláková², Viktor Sýkora,^{1,3}
Martin Šácha¹, Luděk Šefc¹

¹Centrum pokročilého preklinického zobrazování (CAPI), 1. Lékařská fakulta, Univerzita Karlova, Praha, Česká Republika, pavla.francova@lfl.cuni.cz

²Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů (RCPTM), Univerzita Palackého v Olomouci, Olomouc, Česká Republika

³Centrum pro experimentální biomodely (CEB), 1. Lékařská fakulta, Univerzita Karlova, Praha, Česká Republika

Závěrečná etapa vývoje nových zobrazovacích kontrastních látek vždy zahrnuje jejich verifikaci na cílových přístrojích. Po charakterizaci samotných částic a jejich chování v nosném médiu či buňkách je nutno stanovit vhodné parametry nastavení přístrojů, tedy měřicí protokol a metodický postup pro zvolené zobrazovací systémy. Prezentovaný projekt slouží jako modelový příklad verifikace multimodální kontrastní látky (pro více zobrazovacích systémů současně) na bázi magnetických nanočástic SAMN/RITC pro přístroje magnetické rezonance (MRI), zobrazovače magnetických částic (MPI) a fluorescenčního zobrazování.

Prvním krokem je kalibrace přístrojů a stanovení zobrazovacích parametrů na vzorku in-vitro s vhodnou koncentrací (řádově jednotky mg/ml Fe^{2+}) a objemem (50 ul pro MPI, min. 1000 ul pro MRI a optický zobrazovač). Takto nastavený protokol je ověřen při in-vitro zobrazování buněk, značených zkoumanou kontrastní látkou. Pro každý z těchto kroků je nutno kalibrovat přístroj MPI vzhledem k odlišným parametrům média (viskozita, koncentrace železa atd). Po úspěšném stanovení měřicích protokolů a ověření vlastností kontrastní látky je experiment opakován in-vivo na zdravé myši (samice linie C57Bl/6J) s podkožně aplikovanými značenými buňkami v celkové době anestezie 2-3 h.

Výsledkem projektu je stanovený protokol měření na všech přístrojích, metodický list popisující jednotlivé kroky experimentu a ilustrační obrazy z in-vitro a in-vivo měření jednotlivých zobrazovacích systémů.

Tento projekt byl realizován za podpory grantů MEYS CR (LM2015062 Czech-BioImaging) a SVV 260371/2017.

3Po02

POLYSTYRENOVÉ NANOČÁSTICE S PORFYRINOVÝMY FOTOSENSITIZERY: FOTOOXIDAČNÍ VLASTNOSTI A DETEKCE KYSLÍKU

Petr Henke¹, Pavel Kubát², Jiří Mosinger^{1,3}

¹ Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy v Praze, Hlavova 2030, 128 43 Praha 2, Česká republika, henke@natur.cuni.cz

² Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského Akademie věd České republiky, v.v.i., Dolejškova 3, 18223 Praha 8, Česká republika

³ Ústav anorganické chemie Akademie věd České republiky, v.v.i., Řež 1001, 250 68 Řež, Česká republika

Elektrostaticky zvlákněné polymerní nanovlákněné membrány s enkapsulovaným nebo externě vázaným fotosensitizerem efektivně generují singletový kyslík při ozařování viditelným světlem [1, 2]. Z membrán s enkapsulovaným porfyrinem lze pomocí jednoduché nanoprecipitace připravit stabilní fotoaktivní nanočástice [3]. V této práci představujeme nový typ nanočástic s externě vázaným 5,10,15,20-tetrakis(N-methylpyridinium-4-yl) porfyrinem a modifikovanou metodou pro přípravu nanočástic s enkapsulovaným 5,10,15,20-meso-tetrafenylporfyrinem.

Tyto nanočástice byly charakterizovány pomocí měření rozptylu světla, elektronové mikroskopie, ustálené a časově rozlišené absorpční a fluorescenční spektroskopie. Schopnost oxidace externího substrátu byla ověřena pomocí jodidového činidla a antibakteriální vlastnosti byly porovnány vůči modelovému organismu *Escherichia Coli*.

Takto připravené nanočástice s poloměrem okolo 40 nm fotogenerují $\text{O}_2(^1\Delta_g)$ a mají antibakteriální vlastnosti při ozařování viditelným světlem. Na rozdíl od nanovlákněných membrán mohou být použity pro sterilizaci/fotooxidaci v celém objemu roztoku. Oba typy nanočástic vykazují

singletovým kyslíkem zprostředkovanou zpožděnou fluorescenci (SODF). Z fotofyzikálních měření dále vyplývá, že SODF je závislá na koncentraci fotosensitizeru a jeho způsobu navázání v/nanočástici, teplotě a koncentraci rozpuštěného $O_2(^3\Sigma_g^-)$ ve vodě. Aplikace SODF pro detekci kyslíku a monitorování fotooxidačních vlastností ve vodných suspenzích jsou demonstrovány a diskutovány.

Tato práce byla podporována Grantovou agenturou České Republiky (Grant 16-15020S) a OP VVV Charles University Centre of Advanced Materials, CZ.02.1.01/0.0/0.0/15_003/0000417.

- [1] Petr Henke, Halyna Kozak, Anna Artemenko, Pavel Kubát, Jitka Forstová, Jiří Mosinger: ACS Appl. Mater. Interfaces, (2014)
- [2] Petr Henke, Kamil Lang, Pavel Kubat, Miroslav Šlouf, Jiří Mosinger: ACS Appl. Mater. Interfaces, (2013)
- [3] Petr Henke, Kaplan Kirakci, Pavel Kubát, Martin Fraiberk, Jitka Forstová, Jiří Mosinger: ACS Appl. Mater. Interfaces, (2016)

3Po03

NATURAL PRODUCTS BASED THERAPEUTICS

Z. Hlouskova¹⁾, P. Capek²⁾, A. Dvurečenskij³⁾, I. Capek^{1,3)}

SAS, Bratislava, Slovakia: 1) Polymer Institute, 2) Chemical Institute and 3) Institute of Measurement Sciences, Dubravská cesta, Bratislava

Nanotherapeutics hold great promise to solve several limitations of conventional drug delivery system such as nonspecific biodistribution, lack of targeting, lack of aqueous solubility, poor oral bioavailability and low therapeutic indices. Natural products that are a part of our daily diet have shown considerable from anti-inflammatory to anti-neoplastic effects without causing side effects. Among them belong curcumin and its analogues (e.g., indole curcumin analogue (ICA) curcumin-loaded chitosan, cyclodextrin, albumin), α -tomatine, quercetin, hyaluronic acid, etc.). Among the cancer therapeutics, curcumin (diferuloylmethane) is a well-known naturally occurring anticancer drug extracted from Indian spice turmeric (*curcuma longa*). Cur inhibits several important cellular targets such as NF- κ B, and this interaction, in turn, induces apoptosis and blocks the function of protein kinase C, epidermal growth factor receptor tyrosine kinase and HER-2. Curcumin acts as a free radical scavenger and alters the expression of variety of stress proteins.

Also, it inhibits the activity of many important transcription factors and genes involved in angiogenesis. It possesses low intrinsic toxicity along with a wide range of pharmacological activities that include antitumor, anti-amyloid, antioxidant and anti-inflammatory properties. Even though Cur has potential use for various therapeutic applications, a major challenge is its poor aqueous solubility and instability, which leads to poor bioavailability at the target site. Curcumin, α -tomatine, quercetin, chitosan, cyclodextrin, folic acid and hyaluronic acid more effectively in combination (increased aqueous solubility and bioavailability), can efficiently relieve the epigenetic modifications involving methylation dependent suppression of tumor suppressor genes like AR, and the resulting androgen resistance in cancer cells, and thus hold great potential to be used as effective chemopreventives to prevent androgen resistance in CaP. α -Tomatine and curcumin in combination had more potent inhibitory effect on LNCaP, VCaP and PC-3 cells. The combination index (CI) for IC₅₀ was calculated as 0.69, 0.72 and 0.48 for LNCaP, VCaP and PC-3 cells, respectively. This result indicates that the combination of α -tomatine and curcumin synergistically inhibits the growth of cultured prostate cancer cells. The effects of α -tomatine and curcumin on growth inhibition and apoptosis in prostate cancer cells were associated with inhibition of NF- κ B activation and decreased levels of Bcl-2, phospho-Akt and phospho-ERK1/2. Incubation of cancer cells (A549, K562 and SW 480) with indole curcumin analogue (ICA) for 24, for example, resulted in a dose dependent decrease in number of viable cells. ICA had IC₅₀ value of 38–40 mM on A549 cell line, 40–42 mM on K562 cells and 15–17 mM on SW480 cells. The IC₅₀ value of curcumin on A549, K562 and SW480 at 24-h incubation was 42–44 mM, 44–46 mM and 25–27 mM respectively. The bioinert, biodegradable, and biocompatible (poly)saccharides conjugates with natural compounds are considered to act as therapeutics as well to deliver hydrophobic anticancer drugs to target cancer cells.

This work was supported of VEGA MŠ SR and SAV, project No.2 /0040/14.

[M. Tomita, H. Kawakami, J.N. Uchihara, T. Okudaira, M. Masuda, N. Takasu, et al., Int. J. Cancer 118 (2006) 765–772 and O.P. Sharma, Biochem. Pharmacol. 25 (1976) 1811–1812].

3Po04**PRÍPRAVA NANOČASTÍČ PRE DETEKCIU
PLYNNÝCH BIOMARKEROV CHORÔB**

Ana Hološ¹, Jozef Kollár¹, Ján Ivančo², Jaroslav Mosnáček¹

¹Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava

²Fyzikálny ústav SAV, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava

Nanočastice oxidu železa s organickou obálkou, rôznou dĺžkou a štruktúrou reťazca sa pripravili s cieľom vytvoriť chemirezistory pre detekciu stopových koncentrácií acetónu a formaldehydu vo vzduchu. Obe zlúčeniny sú biomarkermi chorôb. Aktívnu časť chemirezistoru tvorí polovodičová vrstva z oxidu kovu, napr. Fe, Co, Ni, W alebo ich zliatin. Podľa štandardného modelu, vodivosť vrstvy chemirezistoru sa mení v dôsledku disociatívnej chemisorpcie molekúl detegovaného plynu na povrchu aktívnej vrstvy: adsorpcia ionizovanej molekuly má za následok vytvorenie elektrónovej pasce alebo generuje nosiče náboja, čím ovplyvní vodivosť vrstvy [1]. V prípade vrstvy nanočastíc (NČ), elektrická vodivosť je určená zložením vrstvy NČ, ich veľkosťou a zložením organickej obálky (surfaktantu). Zmenou medzičasticovej vzdialenosti sa ovplyvňujú aj senzorkové vlastnosti NČ vrstiev ako sú citlivosť a selektivita [2].

V tejto štúdií NČ oxidu železa boli syntetizované tepelným rozkladom a redukciou Fe(acac)₃ za prítomnosti kyseliny olejovej a oleylamínu ako surfaktantov. Niekoľko alkylhalogenidových iniciátorov bolo pripravených s fosforylovou a dopamínovou funkčnou skupinou, ktoré boli následne použité na prípravu dobre definovaných polymérov pomocou radikálovej polymerizácie s vrátnou deaktiváciou (ATRP). Bol skúmaný vplyv štruktúry a dĺžky polyméru (polybutylakrylátu a polystyrénu). K naviazaniu surfaktantu na povrch NČ sa použili dve techniky, “grafting from” a “grafting onto”. Analýza dynamického rozptylu svetla bola použitá na stanovenie veľkosti a distribúcie NČ. Priemer nanočastíc narástol v závislosti od štruktúry a mólovej hmotnosti použitého polyméru z pôvodných 8 nm na 15-20 nm.

Táto práca vznikla za finančnej podpory projektov APVV-14-0891, APVV-15-0545 a APVV-15-0296.

- [1] Seiyama, T., Kato, A., Fujiishi, K., Nagatani, M., Anal. Chem. 34/11 (1962) 1502.

- [2] L. Wang, J. Luo, J. Yin, H. Zhang, J. Wu, X. Shi, E. Crew, Z. Xu, Q. Rendeng, S. Lu, M. Poliks, B. Sammakia, C.-J. Zhong, J. Mater. Chem. 20/5 (2010) 907.

3Po05**NANOŠTRUKTUROVANÉ POVRCHY
POLYMERŮ PRO RŮZNÉ APLIKACE**

Zdeňka Kolská¹, Tereza Knapová¹, Monika Benkocká¹, Viktorie Neubertová¹, Kateřina Kolářová², Václav Švorčík²

¹Ústecké materiálové centrum, PrF UJEP v Ústí nad Labem, České mládeže 8, 400 96 Ústí nad Labem, ČR, zdenka.kolska@ujep.cz

²Ústav inženýrství pevných látek, FCHT, VŠCHT Praha, Technická 3, 166 28 Praha, ČR

Povrchové vlastnosti řady materiálů omezují možnosti jejich aplikace. Proto se vyvíjí v posledních letech metody aktivací a modifikací povrchů tak, aby se důležité povrchové vlastnosti významně a příznivě změnily. V posledních letech hojně využíváme aktivace povrchů pomocí: (i) plazmatu, (ii) UV záření, (iii) působení Piranha roztoků, a následné roubování chemických sloučenin na aktivovaný povrch. Tímto způsobem zlepšujeme např. smáčivost povrchu, drsnost a morfologii, měníme povrchovou chemii i náboj. Všechny tyto vlastnosti pak mají vliv na následnou adhezi např. buněk, jiných látek nebo kovových struktur. Studované materiály pak mohou nalézt uplatnění v optice, elektronice či různých bioaplikacích. Modifikované materiály pak mají např. vyšší cytokompatibilitu [1], silnější antimikrobiální účinky [2], což jsou vlastnosti vítané v oblasti např. tkáňového inženýrství nebo vykazují vysokou intenzitu fluorescence, čehož se může využít při vývoji nových luminoforů [3], apod.

Práce vznikla za podpory GAČR projektu č. 13-06609S a Agentury pro zdravotnický výzkum ČR č. 15-33018A

- [1] Zdeňka Kolská, Alena Řezníčková, Michaela Nagyová, Nikola Slepíčková, Kasálková, Petr Sajdl, Petr Slepíčka, Václav Švorčík: Polym. Degrad. Stabil. (2014), 101: 1-9.
[2] Vladimíra Vosmanská, Kateřina Kolářová, Silvie Rimpelová, Zdeňka Kolská, Václav Švorčík: RSC Adv. (2015), 23:17690-17699.
[3] Zdeňka Kolská, Jindřich Matoušek, Pavla Čapková, Jakub Braborec, Hana Černá, Monika Benkocká, Michael G. S. Londesborough: Appl. Clay Sci. (2015), 118: 295–300.

3Po06**VERIFICATION OF NOVEL MAGNETIC NANOPARTICLES AS A CONTRAST MEDIA FOR MRI-CT/SPECT IMAGING**

Uliana Kostiv², Blanka Laudová¹, Volodymyr Lobaz², Jan Kučka², Pavla Franová¹, Martin Hrubý², Daniel Horák², Luděk Šefc¹

¹Center for Advanced Preclinical Imaging (CAPI), First Faculty of Medicine, Charles University, Prague, Czech Republic

blanka.laudova@lf1.cuni.cz

²Institute of Macromolecular Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, Prague, Czech Republic

Upconversion/magnetic NaGdF₄:Yb³⁺/Er³⁺ nanoparticles have attracted a great deal of attention due to their unique luminescent and paramagnetic properties. Owing to the presence of optically active Yb³⁺/Er³⁺ ions in the NaGdF₄ crystal lattice, the nanoparticles exhibit not only a strong near-infrared to visible photoluminescence, but also short longitudinal relaxation time T_1 enabling contrast in Magnetic Resonance Imaging (MRI). Thus, the NaGdF₄:Yb³⁺/Er³⁺ nanoparticles can be used as multimodal probes for *in vitro* and *in vivo* bioimaging, targeted drug delivery, image-guided surgery, photodynamic and photothermal therapy. In bioapplications, the NaGdF₄:Yb³⁺/Er³⁺ nanoparticles have to fulfill several requirements, such as strong upconversion luminescence, high T_1 relaxation time, colloidal stability in biological media, minimal non-specific protein and cell adsorption. Design of such nanoparticles is still a challenge.

Herein, the hexagonal-phase NaGdF₄:Yb³⁺/Er³⁺ nanoparticles, 13 nm in size, and with a narrow size distribution (Figure 1a) were synthesized by the thermal decomposition of lanthanide chlorides. Particles were coated by in-house synthesized PEG-bisphosphonate. The NaGdF₄:Yb³⁺/Er³⁺ particles were decorated by Bolton-Hunter-bisphosphonate to enable radiolabeling with ¹²⁵I for Single-Photon Emission Computed Tomography/Computed Tomography (SPECT/CT) imaging and MRI. A measurement protocol was set after in-vitro verification and used for serie of in-vivo measurements on healthy mouse with intravenous application.

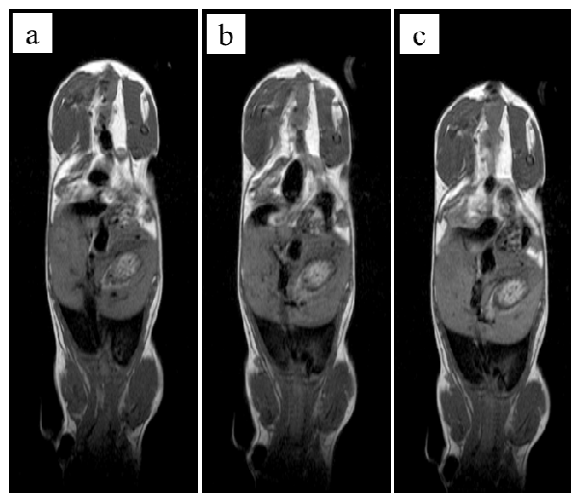


Fig. 1. MRI images of a mouse before (a) and after (b) 0 min, (c) 60 min of intravenous injection of the ¹²⁵I-labeled NaGdF₄:Yb³⁺/Er³⁺@PEG nanoparticles.

This project was financially supported via MEYS CR (LM2015062 Czech-BioImaging) and SVV 260371/2017.

3Po07**PŘÍPRAVA NANOČÁSTIC UŠLECHTILÝCH KOVŮ POMOCÍ PŘÍMÉHO NAPRAŠOVÁNÍ**

Markéta Pišlová¹, Zdeňka Novotná¹, Petr Slepíčka¹, Zdeňka Kolská², Václav Švorčík¹

¹Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav inženýrství pevných látek, Technická 5, Praha 6-Dejvice, 166 28, marketa.pislova@vscht.cz

²Univerzita J. E. Purkyně v Ústí nad Labem, Přírodovědecká fakulta, České Mládeže 8, Ústí nad Labem, 400 96

Tato práce se zabývá přípravou nanočástic ušlechtilých kovů. Zejména se jedná o nanočástice zlata (AuNPs) a platiny (PtNPs). Nanočástice byly připraveny přímým naprašováním do polyethylenglykolu (PEG) s molekulovou hmotností 600 g Mol⁻¹, který zde byl použit jako stabilizátor. Naprášené nanočástice do PEGu byly dále smíchány s vodou [1]. Tento způsob přípravy nanočástic je velmi jednoduchý. Díky tomu, že se během přípravy nepoužívají žádná redukční činidla ani další stabilizátory, bývá označován jako postup, který je šetrný k přírodě.

Takto připravené nanočástice byly dále charakterizovány pomocí atomové absorpční a ultrafialovo-viditelné spektroskopie. Transmisní elektronová mikroskopie byla využita k určení tvaru a velikosti nanočástic. Dynamický rozptyl světla byl použit k potvrzení a upřesnění velikosti

částic. Dále byly provedeny *in vitro* testy cytotoxicity s připravenými nanočásticemi.

Naprášením vznikají kulové nanočástice zlata a tyčinkovité nanočástice platiny. Velikost nanočástic se pohybuje do 10 nm. Při použití přibližně stejných koncentrací nanočástic zlata a platiny byl pozorován větší cytotoxický efekt u nanočástic zlata.

- [1] Petr Slepíčka, Roman Elashnikov, Pavel Ulbrich, Marek Staszek, Zdeňka Kolská, Václav Švorčík: J. Nanopart. Res., (2015)

3Po08

KOVOVÉ NANODRÁTKY NA POLYETHYLENNAFTALÁTU PRO BIOAPLIKACE: PŘÍPRAVA, CHARAKTERIZACE, ANTIBAKTERIÁLNÍ A CYTOTOXICKÉ ÚČINKY

Markéta Polívková¹, Marek Staszek¹, Jakub Siegel¹, Václav Švorčík¹

¹Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, polivkova@vscht.cz

V posledních desetiletích je používání biokompatibilních polymerů ve zdravotnictví ve velkém zájmu. Mají zde široké spektrum použití, jako např. zavádění intravenózních katétrů a endotracheálních trubic [1]. Používání antimikrobiálně neošetřených polymerních materiálů během lékařských zákroků však může vést a často vede ke vzniku a šíření bakteriálních infekcí, které mohou vážně ohrozit životy pacientů. Dalším problémem v této souvislosti je stále rostoucí bakteriální rezistence proti běžným antibiotikům [2]. Proto je nutné zkoumat nekonvenční antimikrobiální látky, jako jsou nanostrukturované ušlechtilé kovy, které by měly vykazovat silnou antibakteriální účinnost umožňující prevenci infekcí, které jsou v příčině souvislosti s léčbou. Zároveň je však důležité zajistit jejich bezpečnější aplikace (toleranci buňkami) [3]. Z těchto důvodů byla zkoumána antibakteriální a cytotoxická aktivita Ag a Pd nanodráteků připravených na povrchu polyethylenafthalátu (PEN), ve zdravotnictví komerčně často používaném materiálu na výrobu velmi silných a tenkých katétrů a dalších zdravotnických prostředků. Povrch kompozitů kov/polymer byl charakterizován pomocí XPS, FIB-SEM a AFM a jejich antibakteriální vlastnosti byly hodnoceny metodou počítání kolonií za použití modelových kmenů grampozitivní a gramnegativní bakterie *Staphylococcus epidermidis* a *Escherichia coli*.

Tolerance buňkami byla ověřena WST-1 testem cytotoxicity. Výrazné antibakteriální účinky byly sledovány v případě obou kovů, ovšem vyšší cytotoxicitu vykazovaly stříbrné nanodrátky.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č. 20-SVV/2017).

- [1] Markéta Polívková, Jakub Siegel, Kateřina Kolářová, Silvie Rimplelová, Václav Švorčík: Chem. Listy, (2016).
[2] Markéta Polívková, Jakub Siegel, Tomáš Hubáček, Marek Staszek, Václav Švorčík: Inter. J. Mol. Sci., (2017).
[3] Markéta Polívková, Veronika Štrublová, Tomáš Hubáček, Silvie Rimplelová, Jakub Siegel, Václav Švorčík: Mater. Sci. Eng. C, (2017).

3Po09

SILVER NANOPARTICLE DECORATED PET: EFFECT OF LASER IMMOBILIZATION

Jakub Siegel, Marek Staszek, Markéta Polívková, Václav Švorčík

Department of Solid State Engineering, UCT Prague, Technická 5, 166 28 Praha, jakub.siegel@vscht.cz

In the beginning of this century nanostructured materials, especially nanoparticles (NPs), initiated technological revolution in almost all areas of human activity. They have been successfully applied in catalysts, energy storage devices, healthcare industry, cosmetics or textile industry. Numerous techniques have been developed to produce those man-made entities since the first pioneering studies in the early 1960's [1]. The successful synthesis itself, however, does not often lead to desired functional product. Especially in catalysis, textile or healthcare industry the immobilization of NPs onto the carrier substrate represent important technological step crucial to the success of developed product in the view of their long-term functionality.

Here we present unique approach for immobilization of electrochemically synthesized silver nanoparticles on polyethyleneterephthalate (PET) foil which lies in the physical incorporation of particles into thin polymer surface layer induced by polarized excimer laser light. Changes in chemical composition and the surface structure of polymer after the particle immobilization were recorded by wide range of analytical techniques such as ARXPS, EDX, RBS, AAS, Raman, ICP-MS, DLS, UV-Vis, SEM, TEM, and AFM.

Conducted analysis revealed that AgNPs were firmly immobilized in the thin PET layer which prevented their release into the water environment even after vigorous sample sonication. Laser-implanted nanoparticles are believed to open up new possibilities in the development of the next generation cell-conform antimicrobial coatings of polymeric materials.

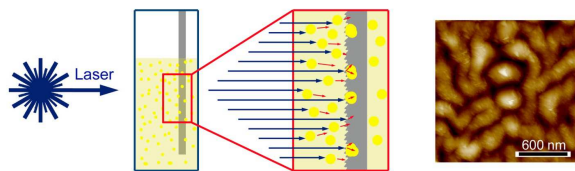


Fig. 1. Schematic illustration of the process of AgNPs immobilization on the PET surface (left) together with AFM image of modified PET (right) [2].

Financial support of this research from the GACR project No. 17-10907S is gratefully acknowledged.

- [1] J. Turkevich, P.C. Stevenson, J. Hillier, A study of the nucleation and growth processes in the synthesis of colloidal gold, *Discuss. Faraday Soc.*, (1951) 55-&.
- [2] J. Siegel, O. Lyutakov, M. Polívková, M. Staszek, T. Hubáček, V. Švorčík, Laser-assisted immobilization of colloid silver nanoparticles on polyethyleneterephthalate, *Appl. Surf. Sci.* 420 (2017) 661-668.

3Po10

LUMINESCENCE TENKÝCH VRSTEV CHALKOGENIDOVÉHO SKLA $\text{Ge}_{25}\text{S}_{75}$ DOPOVANÝCH NANOČÁSTICEMI Cd-S-Se

Stanislav Šlang^{1*}, Liudmila Loghina¹, Karel Pálka^{2,1},
Miroslav Vlček¹

¹Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Centrum materiálů a nanotechnologií, nám. Čs. legií 565, 530 02 Pardubice, Česká republika
Stanislav.slang@upce.cz

²Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Katedra obecné a anorganické chemie, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika

Chalkogenidová skla jsou sloučeninami chalkogenů (S, Se a Te) s dalšími prvky (obvykle As, Ge). Vykazují vysoký index lomu a

dobrou transparentnost v infračervené oblasti spektra. Chalkogenidová skla, a zvláště pak jejich tenké vrstvy, nalézají mnoho praktických aplikací jako jsou např. planární vlnovody, optická záznamová média nebo jako fotorezisty s vysokým rozlišením. V současné době dochází k intenzivnímu rozvoji roztokových depozičních metod využívajících rozpustnosti chalkogenidových skel v organických zásadách (např. spin-coating, dip-coating, spiral bar-coating) [1, 2]. Tyto depoziční metody jsou z instrumentálního hlediska výrazně levnější než běžně využívané vakuové depoziční metody a získané poznatky lze následně aplikovat i na velkoprodukční tiskové metody. Další výhodou těchto metod je i možnost modifikace připravených roztoků, přidáním vhodného dopantu, který je následně deponován spolu s hostitelskou maticí a tvoří vznikající tenkou vrstvu.

První část prezentované práce je věnována vlivu reakčních podmínek při přípravě nanočástic Cd-S-Se na jejich luminiscenční vlastnosti. Roztok syntetizovaných nanočástic a chalkogenidového skla o složení $\text{Ge}_{25}\text{S}_{75}$ byl použit pro depozici opticky kvalitních tenkých vrstev, plně transparentních ve viditelné oblasti spektra. V druhé části práce byl studován vliv teploty a expozice UV zářením na optické parametry, složení a luminiscenci připravených vrstev. Výsledky ukázaly zásadní vliv expozice UV zářením na nárůst intenzity luminiscence studovaných vzorků.

Autoři děkují za finanční podporu projektu č. 16-13876S financovanému Grantovou agenturou České republiky a takéž projektům LM2015082 a ED4.100/11.0251 financovaných Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy České republiky.

- [1] S. Slang, P. Janicek, K. Palka, M. Vlcek, *Optical Materials Express*, 6(6) (2016) 1973-1985.
- [2] S. Slang, K. Palka, H. Jain, M. Vlcek, *Journal of Non-crystalline Solids*, 457 (2017) 135-140.

POSTERY - SEKCIA 4 ANORGANICKÁ A MATERIÁLOVÁ CHÉMIA

4Po01

INTERAKCE STRUSEK S TĚŽKÝMI KOVY

Lenka Bláhová¹, Zuzana Navrátilová¹

¹Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava 1
lenka.blahova23@gmail.com

Strusky, jako odpadní produkty metalurgických výrob, jsou využívány zejména ve stavebnictví. Používají se jako příměsi do cementů a betonů nebo jako zásypový materiál např. do cest. Práce je zaměřena studium interakce strusek s těžkými kovy (kokrétně Cu(II) a Pb(II)) a jejich vliv na strukturu strusky po kontaktu s nimi. Vysokopecní a ocelářenské strusky byly vloženy do prostředí s koncentrací kovu $80 \text{ mmol} \cdot \text{L}^{-1}$ v poměru 1 g : 25 ml roztoku a ponechány za občasného míchání 24 hodin za ambientních podmínek. Roztoky byly tvořeny z $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 3 \text{H}_2\text{O}$ a $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ analytické čistoty. Po 24 hodinách byly suspenze sfiltrány a strusky sycené těžkými kovy byly sušeny volně za laboratorní teploty po dobu 7 dní. Následně byly podrobeny charakteritaci pomocí infračervené spektroskopie metodou KBr. Výsledky byly srovnány s původními materiály a byl navržen možný mechanismus interakce těžkých kovů se struskou.

Děkuji za finanční podporu projektu studentské grantové soutěže SGS04/PŘF/2017.

4Po02

SROVNÁVÁNÍ POVRCHOVÝCH VLASTNOSTÍ CIHELNÝCH OBRUSŮ Z HLEDISKA FIXACE TOXICKÝCH IONTŮ

Eliška Duchková¹, Barbora Doušová¹, Miloslav Lhotka², Petr Mikysek³, David Koloušek¹

¹Vysoká škola chemicko-technologická, Praha, Ústav chemie pevných látek, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika, eliska.duchkova@vscht.cz

²Vysoká škola chemicko-technologická, Praha, Ústav anorganické technologie, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika

³Geologický ústav AV ČR, v. v. i., Oddělení analytických metod, Rozvojová 269, 165 00 Praha 6 - Lysolaje, Česká Republika

Kontaminace půd, povrchových i podzemních vod toxickými ionty (kationty (Cd, Zn, Pb), oxoanionty (As, Sb, Cr) a radioaktivní ionty (U, Cs)) představuje velký environmentální problém a je snaha znečištění odstranit, případně zmírnit. Proto bylo mnoho studií zaměřeno na vývoj nových remediačních technik využívajících adsorpčních jevů k trvalé fixaci iontů s použitím vhodných materiálů [1]. Pozornost je nyní mimo jiné věnována odpadním keramickým materiálům, zejména odpadnímu cihelnému obrusu. Do budoucna je počítáno s tím, že cihelný prach s adsorbovanými toxickými ionty bude zabudován do stavebních hmot a trvale tak uložen. Studie naznačují [2,3], že právě cihelný obrus by mohl být vhodným adsorbentem toxických iontů, nicméně je nutný důkladnější výzkum materiálu.

V rámci výzkumu jsou sledovány povrchové, strukturní a adsorpční vlastnosti tří typů cihelných obrusů z lokalit v České republice. Pomocí RTG difrakce a RTG fluorescence bylo prověřováno chemické a mineralogické složení. Dále byl změřen specifický povrch materiálů (S_{BET}), objem mikropórů a určeno pH_{ZPC} a pucolánová aktivita, tedy parametr, který vyjadřuje vazebné schopnosti materiálu při zabudování do stavebních hmot. Adsorpční experimenty byly provedeny s kationty Pb^{2+} , Cd^{2+} , Zn^{2+} a oxoanionty H_2AsO_4^- , AsO_4^{3-} a $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$. Reziduální koncentrace byly určeny pomocí AAS, HG-AFS analýzy a UV-Vis spektroskopie. Dále byly provedeny vyluhovací testy a prověřována kinetika adsorpce.

Výzkum je podporován Grantovou agenturou ČR (16-13778S (GAČR)).

[1] Bradl, H.B., Journal of Colloid and Interface Science, **277**, 1–18 (2004)

- [2] Dousova, B., Kolousek, D., Keppert, M., Machovic, V., Lhotka, M., Urbanova, M., Holcova, L.: Use of waste ceramics in adsorption technologies. – *Applied Clay Science*, 2016, **143**, 145–152.
- [3] Duchkova, E., Dousova, B., Kolousek, D., Machovic, V., Surface properties of waste brick dust in terms of fixation of toxic ions; – In: 8th Mid-European Clay Conference, 4-8 July 2016, Kosice, Slovakia.

4Po03**PROCESY VEDÚCE K OBOHATENIU PRÍRODNEJ IZOTOPOVEJ ZMESI VANÁDU**

Michal Galamboš¹, Lukáš Krivosudský¹

¹ *Comenius University in Bratislava, Faculty of Natural Sciences, Department of Inorganic Chemistry, Ilkovičova 6, 842 15, Bratislava; Slovakia*
michal.galambos@uniba.sk

V prírode bolo objavených 20 primoridálnych rádionuklidov, z ktorých 17 nie sú členmi premenových radov. Do tejto skupiny patria tri izotopy ⁵⁰V, ¹¹³Cd a ¹¹⁵In považované za stabilné, pretože ich doba polpremeny je väčšia, ako je vek vesmíru ($1,3 \times 10^{10}$ r). Pre všetky tri uvedené izotopy je však rádioaktívny rozpad energeticky povolený. Izotop ⁵⁰V je jedným z dvoch izotopov (druhým je stabilný ⁵¹V s izotopovým zastúpením 99,75 %) prítomných v prírodnej zmesi vanádu. V prípade ⁵⁰V s izotopovým zastúpením 0,25 % sa zistilo, že dolná hranica $T_{1/2}$ je $9,0 \times 10^{16}$ a $6,9 \times 10^{16}$ rokov pre dva spôsoby premeny ⁵⁰V – EC – ⁵⁰*Ti – γ (1,58 MeV) – ⁵⁰Ti a ⁵⁰V – β^- – ⁵⁰*Cr – γ (0,78 MeV) – ⁵⁰Cr. Cieľom tejto práce je hľadanie možností pre obohatenie zmesi vanádu izotopom ⁵⁰V.

APVV project no. SK-AT-2015-0003 and VEGA project no. 1/0507/17.

- [1] Sonntag Ch., Munnich K. O.: *Zeitschrift für Physik*, (1966)
- [2] Wu F., Qin T., Li X., Liu Y., Huang J.-H., Wu Z., Huang F.: *Earth and Planetary Science Letters*, (2015)
- [3] Nagorny S., Laubenstein M., Pagnanini L., Pattavina L., Pirro S., Schaffner K.: V10 Symposium, Taipei, Taiwan, (2016)

4Po04**3-D PRINTING AS TECHNIQUE FOR THE PRODUCTION OF FUNCTIONAL CERAMIC OBJECTS**

Zora Hajdúchová¹, Peter Veteška¹, Ľuboš Bača¹, Jozef Feranc², Marián Janek^{1,3}

¹ *Department of Inorganic Materials, FCHPT, STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia.*

² *Department of Plastics Rubber and Fibers, FCHPT, STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia.*

³ *Department of Physical and Theoretical Chemistry, Comenius University, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, CH-1, 842 15 Bratislava, Slovakia.*

zora.hajduchova@stuba.sk

Additive manufacturing (AM) also known as 3D printing is a process that creates a solid object from a computer aided object design. The development of new applications has limitation in utilisation of suitable material used in 3D printing technology. From these reasons the development of novel materials is strongly required. Ceramic materials usable for AM techniques may include application in fused deposition of ceramics (FDC), which creates 3D solid parts from computer aided design (CAD) data by deposition of molten material layer by layer. For this purpose polymer/ceramic composites with defined thermoplastic behaviour are required. The main advantage of FDC technology is their ability to create objects from ceramic-polymer filaments with precise microstructure and details, which are difficult to achieve by traditional technologies based on material removing. Filaments suitable for 3D printing of ceramic green bodies have to be sophisticatedly designed to meet several criterias for their final application especially in commercially available fused deposition modelling (FDM) devices. The aim of this work is to study a polymer-ceramic composite filament suitable for preparation of 3D green bodies by FDC. Additionally first tests with the de-binding and sintering of 3D printed composite objects have been performed.

The financial support from the Slovak Grant for Science and Technology VEGA No. 1/0906/17 and APVV-I6-0341 is gratefully acknowledged.

4Po05**REACTION OF PFCS IN WATER STABILIZED PLASMA**

Libor Mastný¹, Jan Horníček¹, Oldřich Živný²,
Vlastimil Brožek², Viktor Sember²

¹University of Chemistry and Technology Prague,
Technická 5, 16628 Praha, libor.mastny@vscht.cz

²Institute of Plasma Physics CAS v.v.i. Za Slovankou 3,
18200 Praha
zivny@ipp.cas.cz

In order to investigate plasma abatement of highly stable fluorocarbons using steam plasma generated by water stabilized DC-plasma torch equilibrium composition and thermodynamic properties of the system formed by decomposition products were calculated [1]. The first step of the joined bilateral project solved by Institute of plasma Physics of the CAS and NTU and INER at Taiwan is the investigation of the processes $\text{CF}_4 + 2 \text{H}_2\text{O} = \text{CO}_2 + 4 \text{HF}$, which efficient at temperatures above 4000 °C [2]. For such the reaction course the modification of the plasma chemical reactor are required in order to be sufficiently resistant to the produced hydrogenfluoride. Therefore, corrosion resistance of the materials made from boron nitride and titanium nitride was investigated. Both the materials are mechanically and chemically stable up to 3000 °C. These materials were selected because of the plasma generator itself produces nitrogen oxides which, after reaction with water, give rise to acid environment to which these materials exhibit high corrosion resistance. The samples of BN and TiN has been prepared by Spark plasma sintering method. The reactivity of the TiN samples was compared to the corresponding thin films prepared by magnetron sputtering method.

This work was supported under GA CR project No. GC17-10246J: Decomposition of perfluorinated compounds and fluorinated ozone depleting substances in thermal plasma jets

- [1] Coufal O., Sezemský P., Živný O.: Database System of Thermodynamic Properties of Individual Substances at High Temperatures, J. Phys. D: Appl. Phys. 38 (2005) 1265.
- [2] SH. Chen, YC Chen, CC Tzeng, Perfluorocarbons Destruction by Thermal Plasma Torch at Atmospheric Pressure, 26th Symposium on Plasma Physics and Technology (SPPT 2014), Oct. 13-14 Prague, Czech Republic, (2014).

4Po06**STANOVENÍ TEXTURNÍCH CHARAKTERISTIK BIOUHLÍ (BIOCHAR)**

Miloslav Lhotka¹, Veronika Liworová¹

¹VŠCHT Praha, Ústav anorganické technologie,
Technická 5, Praha 6-Dejvice, 166 28,
Miloslav.Lhotka@vscht.cz

Biouhel, běžně nazývaný anglickým termínem „biochar“, je vysoce porezní, jemný materiál, bohatý na uhlík. Biochar se vyrábí pyrolýzou z různých vstupních surovin organického původu. Druh výchozího materiálu biomasy, stejně jako definované pyrolýzní podmínky mají vliv na výsledné vlastnosti biocharu. Je zřejmé, že fyzikální vlastnosti biocharu, jako je hustota, specifický povrch a porozita, ovlivní jeho transport v životním prostředí, jeho interakci s hydrologickým cyklem půdy a jeho vhodnost pro půdní mikroorganismy. Pro charakterizaci biochar bylo provedeno stanovení specifického povrchu podle metody BET, specifického povrchu podle metody t-plot, celkového objemu pórů, objemu mikropórů a distribuce objemu mezopórů a mikropórů pomocí sorpce dusíku při 77 K. Dále byla pomocí Hg-porozimetrie zjištěna porozita, zdánlivá hustota a distribuce objemu makropórů. Pomocí He-pyknometrie byla stanovena hodnota skutečné hustoty biocharu. Tvary adsorpčních izoterem odpovídají typu I a III v souladu s definicí IUPAC, z čehož vyplývá, že v biocharu jsou z velké části zastoupeny mikropóry. Zpracováním dat z adsorpčních izoterem metodou t-plot bylo zjištěno, že specifický povrch mezopórů ($S_{t\text{-plot}}$) je výrazně nižší než specifický povrch určený metodou BET. V této studii jsme se pokusili o komplexní analýzu biochar s velmi zajímavými výsledky. Závěrem lze říci, že texturní vlastnosti biocharu hrají klíčovou roli v pochopení vlivu vstupních surovin a pyrolýzních podmínek.

This work was realized within the Operational Programme Prague – Competitiveness (CZ.2.16/3.1.00/24501) and “National Program of Sustainability” (NPU I LO1613) MSM-43760/2015.

- [1] J. Lehmann et al., Mitig. Adapt. Strategies Glob. Chang. 2006, 11, 403.
- [2] K. A. Spokas, Carbon Manag. 2010, 1(2), 289.
- [3] K. Břendová, P. Tlustoš, J. Száková, M. Bohuněk: Využití biouhlí (biocharu) k úpravě půdních vlastností. Biom.cz [online]. 2015-02-02

4Po07**ADSORPCE CO₂ NA BIOUHLÍ (BIOCHAR)**Veronika Liworová¹, Miloslav Lhotka¹

¹VŠCHT Praha, Ústav anorganické technologie,
Technická 5, Praha 6-Dejvice, 166 28,
v.liworova@seznam.cz, Miloslav.Lhotka@vscht.cz

Biochar (česky biouhel) je materiál organického původu, jehož charakteristickou vlastností je rozvinutá porézní struktura. Tento materiál vzniká termickým spalováním organických látek bez přístupu vzduchu. Je vyráběn především ze zbytkové a odpadní biomasy, kam patří například komposty, zvířecí odpady, dřevní hmota apod. Jeho nejdůležitější složkou je organický uhlík, který tvoří 50 – 90 % celkové hmotnosti. Cílem měření bylo stanovit specifický povrch a distribuci objemu pórů vzorků biocharu vyrobených z topolu, kukuřice a sena. Podstata měření velikosti specifického povrchu tuhých látek spočívá v určení množství plynných molekul, potřebných k pokrytí měřeného povrchu monovrstvou. Ke stanovení specifického povrchu byla použita metoda adsorpce oxidu uhličitého při různých teplotách. Z těchto dat byly následně sestrojeny adsorpční izotermy, ze kterých byl určen specifický povrch. Z výsledků lze konstatovat, že s rostoucí teplotou pyrolýzy roste specifický povrch. Ovšem při dosažení maximální teploty dojde k uzavírání porézní struktury a specifický povrch začne klesat, což může být způsobeno postupnou kondenzací aromatických uhlíků do shluku blížící se grafitu.

This work was realized within the Operational Programme Prague – Competitiveness (CZ.2.16/3.1.00/24501) and “National Program of Sustainability” (NPU I LO1613) MSMT-43760/2015.

- [1] V. Liworová: Stanovení texturních charakteristik biochar. Bakalářská práce, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Praha, 2016
- [2] J. Lehmann, S. Joseph: Biochar for environmental management: Science and technology. 2012; p 1-416
- [3] K. Břendová, P. Tlustoš, J. Száková, M. Bohuněk: Využití biouhlí (biocharu) k úpravě půdních vlastností. Biom.cz [online]. 2015-02-02

4Po08**SPHEROIDIZATION OF INORGANIC COMPOUNDS BY THE LPPS METHOD**Libor Mastný¹, Vlastimil Brožek², Jan Medřický², Ivo Marek¹

¹University of Chemistry and Technology Prague,
Technická 5, 16628 Praha, libor.mastny@vscht.cz

²Institute of Plasma Physics CAS v.v.i. Za Slovankou 3,
18200 Praha
brozek@ipp.cas.cz

In this study, preparation of spheroidized inorganic compounds by Liquid Precursor Plasma Spraying (LPPS) method is presented. The LPPS method uses inorganic precursors in liquid form which are injected into the plasma where thermal decomposition of the precursors occurs and new materials can be synthesized. The WSP-H plasma torch, developed at IPP Prague, is used as a source of high enthalpy plasma. The WSP-H can reach power of 160 kW, plasma temperature up to 30000 K and plasma exit velocity up to 4000 m/s [1]. The precursors are injected into the hot plasma where the stream of liquid is rapidly fragmented to small droplets following the Weber and Ohnesorge criteria. Afterwards, the liquid is evaporated and new material crystallises, immediately being melted and spheroidized. The spheroidized particles can be then collected in a tank filled with water or liquid nitrogen. When the concentration of the precursor solution is less than 5 wt%, particles with diameter lower than 100 nm are formed. Spheroidized nanometric compounds were successfully prepared LPPS of solutions of nitrate, chloride and chromium salts [2, 3]. The final materials, in a form of spinels, ferites or even superconductive YBaCu-123 were characterised by photon correlation spectroscopy and L*a*b* spectrum.

The experimental work was supported by the Czech Science Foundation through grant No. GA15-12145S: Physical aspects of plasma spray deposition from liquid feedstock.

- [1] Chráska T., Hrabovský M., Glanc A., Mušálek R., Medřický J. : Properties of Novel Hybrid Water-Gas DC Arc Plasma Torch. Electronic Proceedings of ETSA workshop 2014, University of West Bohemia Plzeň, 2014 (Houdková, Š., Křenek, T.) ISBN 978-80-261-0433-9.
- [2] Mastný L., Vilémová M., Brožek V.: *ChemZi* 9 [1] (2013) 176-177.
- [3] Bertolissi G., Brožek V., Chráska T., Mušálek R., Neufuss K., Mastný L., Sofer Z.: NANOCON 2012 – Conf. Proceedings. Ostrava, Tanager, 2012, s. 33-38. ISBN 978-80-87294-32-1.

4Po09**VPLYV Al_2O_3 A LiF NA VLASTNOSTI NÍZKOTOPACÍCH SA ELEKTROLYTOV NA BÁZE KF- AlF_3 SYSTÉMOV**

Jarmila Mlynáriková¹, Blanka Kubiková¹,
Miroslav Boča¹

¹Ústav anorganickej chémie - SAV, Dúbravská cesta
9, 84536 Bratislava
jarmila.mlynarikova@savba.sk

V danom príspevku je diskutovaný vplyv prídavku Al_2O_3 a LiF na teplotu primárnej kryštalizácie a hustotu draselného kryolitu s nízkym kryolitovým pomerom $\text{KF}/\text{AlF}_3 = \text{CR} = 1,7; 1,5$ a $1,3$. Koncentrácia LiF v študovaných kryolitových systémoch bola (0, 5 a 10) hmot.% LiF a koncentrácia Al_2O_3 (0 a 5) hmot.%. Teplota primárnej kryštalizácie študovaných systémov $\text{KF}-\text{AlF}_3$ -LiF a $\text{KF}-\text{AlF}_3$ -LiF- Al_2O_3 bola meraná termickou analýzou [1], hustota Archimedovou metódou [2].

Zvyšovanie koncentrácie LiF (0, 5 a 10) hmot.% v elektrolyte $\text{KF}-\text{AlF}_3$ sa na teplote primárnej kryštalizácie pri jednotlivých kryolitových pomeroch prejavuje odlišne. Zvyšovanie koncentrácie LiF v elektrolyte $\text{KF}-\text{AlF}_3$ s $\text{CR} = 1,7$, postupne znižuje teplotu primárnej kryštalizácie. V elektrolyte $\text{KF}-\text{AlF}_3$ s $\text{CR} = 1,5$ má krivka likvidu minimálnu hodnotu po pridaní 5 hmot.% LiF (teplota primárnej kryštalizácie je 761°C), kým v elektrolyte s $\text{CR} = 1,3$ má krivka likvidu maximálnu hodnotu po pridaní 5 hmot.% LiF, 751°C .

Prídavok 5 hmot.% Al_2O_3 do elektrolytu $\text{KF}-\text{AlF}_3$ -LiF pri každom kryolitovom pomere ($\text{CR} = 1,7; 1,5$ a $1,3$) znižuje teplotu primárnej kryštalizácie a tiež aj hustotu elektrolytu.

Výhoda využitia elektrolytov na báze KF oproti súčasným konvenčným elektrolytom spočíva v znížení pracovnej teploty a hustoty elektrolytov, pričom sa zachová stále dostačujúca rozpustnosť Al_2O_3 v elektrolyte. Nižšia hodnota hustoty elektrolytov na báze KF, ako je hustota konvenčného elektrolytu, vytvára lepšie podmienky pre oddelenie tekutého hliníka od elektrolytu.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe Zmluvy č. SK-CN-2015-0014.

- [1] Šimko F.; *Chemical Papers* 66(3) 235-238 (2012)
[2] Zuzana Vasková, Martin Kontrík, Jarmila Mlynáriková, Miroslav Boča; *Metall. and Materi. Trans. B*, 48 485-493 (2015)

4Po10**FOTOINDUKOVANÉ ZMĚNY V TENKÝCH VRSTVÁCH CHALKOGENIDOVÉHO SKLA O SLOŽENÍ $\text{As}_{20}\text{Ge}_{12,5}\text{S}_{67,5}$ PŘIPRAVENÝCH METODOU SPIN-COATING**

Karel Pálka^{1,2}, Stanislav Šlang², Miroslav Vlček²

¹ Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika
² Centrum materiálů a nanotechnologií, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legii 565, 530 02 Pardubice, Česká republika
karel.palka@upce.cz

Chalkogenidová skla (ChS) jsou neoxidová skla, která ve své struktuře obsahují chalkogen/y (S, Se nebo Te) namísto kyslíku. Díky svému složení vykazují ChS širokou oblast propustnosti v IČ a vysoké hodnoty indexu lomu. V závislosti na formě vzorku (objemové sklo, vlákno, tenká vrstva), metodě a podmínkách přípravy mohou ChS vykazovat fotocitlivost - expozicí elektromagnetickým záření vhodné energie a intenzity dochází ke změně struktury materiálu a tím i ke změně jeho fyzikálně-chemických vlastností (např. optické parametry, chemická odolnost apod.) [1].

Praktické aplikace ChS často využívají tenké vrstvy ChS deponované na nosném substrátu. Klasicky užívané techniky pro depozici tenkých vrstev ChS jako je např. vakuové napařování, naprašování či laserová ablace, jsou v poslední době doplňovány metodami využívajícími rozpustnosti ChS v organických zásadách. Patrně nejstudovanější metodou depozice tenkých vrstev ChS z jejich roztoků je spin-coating. Další metody jsou předmětem intenzivního výzkumu [2].

Prezentovaná práce se zabývá studiem optických vlastností, chemické odolnosti, struktury a složení tenkých vrstev ChS o složení $\text{As}_{20}\text{Ge}_{12,5}\text{S}_{67,5}$ připravených metodou spin-coating. Byly pozorovány výrazné foto- a termo-indukované změny v optických parametrech tenkých vrstev (index lomu a optická šířka zakázaného pásu), jejich povrchové drsnosti, tloušťce a obsahu organických reziduí. Při studiu kinetiky leptání exponovaných a neexponovaných tenkých vrstev byla zaznamenána výrazná změna v selektivitě leptání v závislosti na teplotě temperace vzorku před expozicí.

Autoři děkují za finanční podporu projektu č. 16-13876S financovanému Grantovou agenturou České republiky a takéž projektům LM2015082 a

ED4.100/11.0251 financovaných Ministerstvom školství, mládeže a tělovýchovy České republiky.

- [1] Stanislav Šlang, Karel Pálka, Himanshu Jain, Miroslav Vlček: , J. Non-Cryst. Solids 457 (2017) 135-140
- [2] Karel Pálka, Tomáš Syrový, Siegmund Schöter, Sven Brückner, Manfred Rothhardt, Miroslav Vlček: Opt. Mater. Express 4 (2) (2014) 384 - 395

4Po11

SYNTHESIS OF OXIDE CERAMIC NANOMATERIALS FROM ELECTROSPUN POLYMER PRECURSOR BLENDS

Ivan Shepa¹, Erika Múdra¹, Magdaléna Strečková¹, Ján Duzsa¹

¹Institute Of Materials Research, Slovak Academy of Science, Watsonova 47, 040 01 Košice
ishepa@saske.sk

Electrospinning, has been known for decades, but in recent time, it received a new wave of interest because of its great potential and possibilities. Now, after few inventions and modifications of basic setup, what allow to achieve a high productivity, it is one of the most perspective technologies for nanomaterials and nanostructures preparation. It is universal and easily tunable technology, by which a wide range of fibrous materials and composites can be produced. Heat treatment and surface plasma treatment of electrospun fibers can be used for transformation from precursors directly to a ceramic (or carbon) fibers or complex composites (which combines the properties of ceramic and polymer materials) [1,2].

Oxide ceramic materials such as aluminum oxide, zinc oxide, titanium dioxide, tin dioxide, zirconium dioxide and some others are widely used as refractories, sensitive elements of sensors, catalysts, photocatalysts in dye-sensitized solar cells and water treatment. Due to the specific properties of nanofibers, such as high surface-area-to-volume ratio, high porosity, appreciable mechanical strength, these materials in nanofibrous form shows better characteristics and are used in advanced composite materials. That's why development of new methods for synthesis of oxide ceramic nanofibers has a great importance in modern materials science.

This work was supported by the project APVV-15-0469 and the project VEGA 2/0163/16.

- [1] Hui Wu, Wei Pan, Dandan Lin, Heping Li: Journal of Advanced Ceramics, (2012)

- [2] E. Mudra, M. Streckova, D. Pavlinak, V. Medvecka, D. Kovacik, A. Kovalcikova, P. Zubko, V. Girman, Z. Dankova, V. Koval, J. Duzsa: Applied Surface Science, (2017)

4Po12

OXOFLUOROALUMINATES IN THE SYSTEM RbF–AlF₃–Al₂O₃–Rb₂O: THERMAL STABILITY AND STRUCTURAL CORRELATION

František Šimko¹, Aydar Rakhmatullin², Pierre Florian², Martin Kontrík¹, Zuzana Netriová¹, Catherine Bessada²

¹ Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, Slovak Republic, uachsim@savba.sk

² Conditions Extrêmes et Matériaux: Haute Température et Irradiation, CEMHTI, UPR 3079 - CNRS Univ. Orléans 450 71 Orléans, France

Oxofluoroaluminates with monovalent cation are newly interesting materials as high ionic conductors with their interesting "charge" properties and interesting optical properties [1, 2]. The scientific objectives of the present work are focused on the synthesis and chemistry of the new rubidium-oxofluoroaluminate compound and on the description of the ionic structure of RbF–Al₂O₃ native fluoride system. The solubility of Al₂O₃ in RbF melts was investigated. The part of phase diagram of the system with Al₂O₃ content to 35 mol% was examined by thermal analysis method. It has been defined as a quasi binary system, denoted as stable diagonal section of the ternary reciprocal system RbF–Al₂O₃–Rb₃AlF₆–RbAlO₂. The demarked individual phase fields were identified by MAS NMR spectroscopy and X-ray diffraction methods. The pure reference compounds α-Rb₃AlF₆, RbAlO₂, Rb₂Al₂₂O₃₄, and Rb₂Al₂O₃F₂ were prepared and characterized by various solid state NMR techniques including MQMAS, REDOR and D-HMQC. The formation of a new phase Rb₂Al₂O₃F₂ was observed. A ⁸⁵Rb–¹⁹F and ²⁷Al–¹⁹F 2D D-HMQC-HETCOR NMR experiment performed on Rb₂Al₂O₃F₂ revealed the existence of two distinguishable rubidium sites, one aluminium in fourfold coordination and one fluorine atom. The conclusions will be reflect the nature of species originating in investigated system, chemical bonding between them.

The work was financially supported by the CAMPUS FRANCE (PHC STEFANIK project N° 31799NM), the Slovak bilateral project (N° SK-FR-2013-0039) and Slovak Grant Agencies (VEGA-2/0116/14; APVV-15-

0738). We acknowledge the facilities of “IR RMN” at the NMR 850MHz spectrometer.

- [1] Burmakin, E. I., et al.: *Russian Journal of Electrochemistry* 40 (2004) 619.
- [2] Kubel, F.; U.S. Patent Application No. 11/912,280, (2006).

4Po13

PRODUCTION AND CHARACTERIZATION OF CARBONIZED SORBENT PRODUCTS OPTIMIZED FOR ANIONIC CONTAMINANTS

Eva Viglasova^{1,2}, Michal Galambos¹, Dávid Divis¹, Rebecca Hood-Nowotny², Gerhard Soja²

¹ Comenius University in Bratislava, Faculty of Natural Sciences, Department of Inorganic Chemistry, Ilkovičova 6, 842 15, Bratislava; Slovakia

² Austrian Institute of Technology GmbH, Energy Department, Environmental Resources and Technologies, Konrad-Lorenz-Straße 24, 3430 Tulln, Austria

viglasova@fns.uniba.sk

Biochar has proved a good potential as a new tool in removal and separation technologies of various pollutants in wastewater or contaminated soils remediation.

The sorption potential of biochars for cationic forms of heavy metals has been studied intensively, and has already led to successful pilot applications in the field. However, anionic compounds (e.g. phosphate, nitrate etc.) do not sorb well to unmodified biochar and need specific surface modification of biochar [1].

Based on this fact, we try to obtain data about the sorptive separation of anionic contaminants forms by different types of biochar-derived sorbents, or mineral-enriched biochar-derived sorbents. An important part of this research is the assesment of the effects of varying process parameters during biomass carbonisation, the role of biomass feedstock and pre-and/or post-treatment of the biochars onto sorption processes. We specify the most appropriate application strategies with biochar for remediation purposes of waste water or contaminated waters with elevated toxic metal concentrations that might compromise the quality of surface waters [2, 3].

The main aims of research are the preparation of modified biochar sorbent, the characterization of its surface and the investigation about sorption properties of prepared materials for various contaminants, mainly their anionic forms.

This work was supported by scholarship program Ernst Mach Grant, Ernst Mach Grants Action Austria-

Slovakia ICM-2016-03533, APVV project no. SK-AT-2015-0003 and VEGA project no. 1/0507/17.

- [1] Vladimír Frišták, Barbora Richveisová, Eva Viglašová, Libor Ďuriška, Michal Galamboš, Eduardo Moreno-Jimeez et al: J IRAN CHEM SOC, (2017)
- [2] Ronghua Li, Jim J. Wang, Baoyue Zhou, Mukesh Kumar Awasthi, Amjad Ali, Zengqiang Zhang et al: SCI TOTAL ENVIRON, (2016)
- [3] Anushka Upamali Rajapaksha, Season S. Chen, Daniel C.W. Tsang, Ming Zhang et al: CHEMOSPHERE, (2016)

4Po14

SYNTÉZA, CHARAKTERIZACE A BIOLOGICKÁ AKTIVITA KATIONTOVÝCH VANADOCENOVÝCH A 1,1'-DIMETHYLVANADOCENOVÝCH KOMPLEXŮ

Lucie Melounková¹, Aneta Machálková², Radim Havelek³, Jan Honzíček², Jaromír Vinklárček⁴

¹Katedra analytické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice

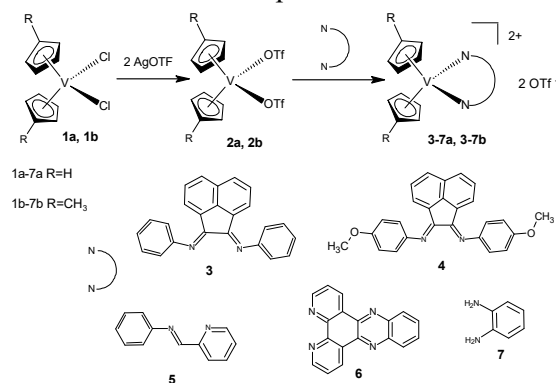
²Ústav chemie a technologie makromolekulárních látek, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice

³Ústav lékařské biochemie, Lékařská fakulta UK v Hradci Králové, Zborovská 2089, 500 03 Hradec Králové

⁴Katedra obecné a anorganické chemie, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice jaromir.vinklarek@upce.cz

Rozvoj rezistence nádorových onemocnění vůči dosavadní léčbě vede k hledání nových medikamentů. Do skupiny perspektivních neplatinyových cytostatik patří i vanadocenové komplexy s N,N'-chelátově vázanými ligandy [1-2]. Jejich příprava spočívá ve dvou navazujících reakčních krocích (schema 1). Izolované produkty byly charakterizovány pomocí hmotnostní spektrometrie, IR a EPR spektroskopie. Pro studium cytotoxického účinku pomocí průtokové cytometrie, spektrálních metod a Western blottingu v kombinaci SDS-PAGE s imunochemickou detekcí byly vybrány vysoce účinné komplexy **3b** a **4b**. Oba testované komplexy mají výrazný anti-proliferativní účinek během 24 h působení komplexů na linii buněk A549. V menší míře dochází k aktivaci apoptického procesu vyvolaného skrz vnitřní mitochondriální dráhu aktivací kaspázy 8 přes fosforylaci proteinu p53 na serinu 392 a aktivaci proapoptického člena rodiny Bcl-2. K podstatným změnám dochází i v množství MAPK zejména ERK1/2 a následně jeho fosforylované formy.

Zvýšená exprese proteinů inhibujících proliferaci po poškození vede ke změnám v buněčném cyklu buněk, kde byla detekována zástava v S-fázi se zapojením proteinu p21. Aplikaci testovaných komplexů na buňky A549 způsobuje také G2 blok se zapojením up-regulace ChK1 a ChK2 a jejich fosforylovaných forem ChK1_345 a ChK2_68. Výsledky ukazují, že by komplexy **3b** a **4b** by mohly být perspektivními látkami v léčbě adenokarcinomu plic.



Schema 1. Příprava vanadocenových komplexů s N,N'-vázanými ligandy.

Práce vznikla za podpory projektu Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy, UPA SGS 2017_005.

- [1] J. Vinklársek, H. Hurychová, J. Honzíček, L. Šebestová, Z. Padělková, M. Řezáčová, Eur. J. Inorg. Chem. 14 (2013) 2665-2672.
- [2] L. Šebestová, J. Vinklársek, J. Honzíček, Z. Růžicková, M. Řezáčová, Chim. Acta 427 (2015) 211-218.

POSTERY - SEKCIA 5 ORGANICKÁ CHÉMIA

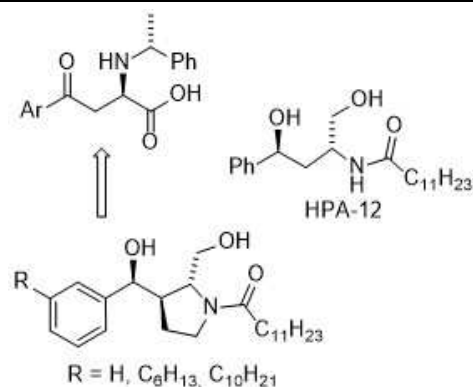
5Po01

γ-OXO-α-AMINO ACIDS AS 1,3-BIFUNCTIONAL NUCLEOPHILES IN THE SYNTHESIS OF CONSTRAINT HPA-12'S ANALOGUES

Marián Zeman¹, Branislav Ferko¹, Dušan Berkeš¹

¹ Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia
dusan.berkes@stuba.sk

During the last years, a significant effort has been focused on the design and preparation of novel nonproteinogenic amino acids and their synthetic applications. Enantiomerically pure N-substituted γ-oxo-α-amino acids accessible via our CIAT applications in tandem with *aza*-Michael and Mannich reactions.[1] They represent suitable chiral synthons and have been used for the stereodivergent synthesis of ceramide metabolism inhibitors recently.[2]



Now we present the convenient two-step synthesis of polysubstituted pyroglutamic acid derivatives. The key step of this sequence is a high diastereoselective intramolecular C-C bond formation *via* the enolates of the corresponding N-acylated γ-oxo-α-amino acids. Additionally, the presentation will address their transformations to the constraint analogues of HPA-12 – the first inhibitor of intracellular ceramide transport with an incorporated pyrrolidine ring system.

This work was supported by Slovak Grant Agency APVV-16-0258.

- [1] Berkeš D., Jakubec P., Winklerová D., Povazanec F., Daich A., Org. Biomol. Chem., 5, 121, (2007). Jakubec P., Petráš P., Ďuriš A., Berkeš D., Tetrahedron-Asymmetry 21, 69, (2010).
- [2] Berkeš D., Daich A., Santos C., Ballereau S., Génisson Y., Chem. Eur. J. 22, 17514, (2016).

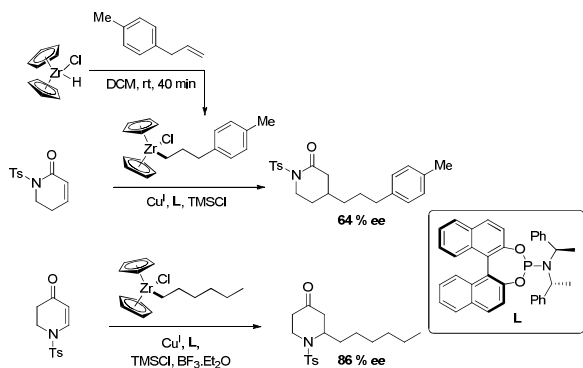
5Po02

Cu-KATALYZOVANÉ KONJUGOVANÉ
ADÍCIE ORGANOZIRKONIČITÝCH
NUKLEOFILOV NA α,β -NENASÝTENÉ
HETEROCYKICKÉ ENÓNY

Stanislav Bilka, Ivana Némethová, Radovan Šebesta

Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká
fakulta, Katedra organickej chémie, Ilkovičova 6,
Mlynská Dolina, 842 15 Bratislava 4
stanislav.bilka@gmail.com

Enantioselektívna konjugovaná adícia organo-
kovových zlúčenín na α,β -nenasýtené zlúčeniny
sa ukázala ako veľmi účinný nástroj na tvorbu C-
C väzieb [1]. Použitie organozirkoničitých
nukleofilov generovaných *in situ* zo
Schwarzového činidla a terminálneho alkénu bolo
v posledných rokoch študované skupinou
Fletcher a kol. [2]. Avšak použitie α,β -
nenasýtených heterocyklických enónov ako
Michaelových akceptorov nie je dostatočne
preskúmané. Výhoda použitia
organozirkoničitých zlúčenín je v ich vyššej
tolerancii k rôznym donorným aj akceptorným
funkčným skupinám. Ukázalo sa že
fosforamiditové ligandy katalyzujú adíciu
rôznych organozirkoničitých nukleofilov na α,β -
nenasýtené heterocyklické enóny. Produkty
konjugovaných adícií sa získali s enantiomérnymi
čistotami až do 86 % ee.



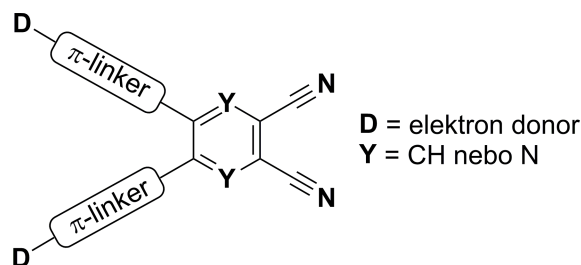
- [1] Hayashi, T., Yamasaki, K. *Chem. Rev.* **2003**, *103*, 2829-2844.
[2] Sidera, M.; Roth, P.M.C.; Maksymowicz, R.M.; Fletcher, S.P. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, *52*, 7995-7999.

5Po03

PUSH-PULL MOLEKULY VE TVARU
PÍSMENE XFilip Bureš¹, Milan Klikar¹, Jiří Tydlitát¹, Zuzana Hloušková¹

¹Ústav organickej chémie a technológie, Fakulta
chemicko-technologická, Univerzita Pardubice,
Studentská 95, Pardubice, 53210
filip.bures@upce.cz

Rozložení π -konjugovaných systému push-pull
molekul je v súčasnej dobe veľmi rôznorodé.
Vedľa bežných lineárnych D- π -A systémů (D =
donor, A = akceptor, π = konjugovaný systém
násobných väzieb) môže push-pull molekula
rovněž zaujímať tvar, ktorý více či méně
pripomína písmena abecedy [1]. Chromofory
s usporiadaním ve tvaru písmene X pak
reprezentují jednu z nejpozoruhodnějších skupin.
V push-pull sloučeninách obecně dochází
k vnitřnímu přenosu náboje z donoru na akceptor
a tento vnitřní přenos náboje odpovídá rovněž za
jejich unikátní optoelektronické vlastnosti. V naší
skupině jsme se v nedávné době zaměřili na push-
pull molekuly na bázi (hetero)aromátů, jmenovitě
na bázi dikyanbenzenu (DCB) a dikyanpyrazinu
(DCP) [2]. Obě tyto jednotky se ukázaly jako
vhodné pro konstrukci chromoforů s nelineárně
optickými vlastnostmi. Jemné ladění jejich
vlastností bylo provedeno připojením vhodných
elektron donorů a změnou rozsahu a složení π -
systému. Deriváty s methoxythienylovými
jednotkami se ukázaly jako velmi efektivní
fotoredox katalyzátory např. cross-
dehydrogenativního couplingu [3].



Obr. 1. Obecná struktura push-pull chromoforů ve tvaru písmene X.

Tato práce byla podpořena Technologickou agenturou České republiky (TE01020022, Flexprint).

- [1] M. Klikar, P. Solanke, J. Tydlitát, F. Bureš: *Chem. Rec.* **2016**, *16*, 1886.
[2] F. Bureš, H. Čermáková, J. Kulhánek, M. Ludwig, W. Kuznik, I. V. Kityk, T. Mikysek, A. Růžicka: *Eur. J. Org. Chem.* **2012**, 529.
[3] Y. Zhao, C. Zhang, K. F. Chin, O. Pytela, G. Wei, H. Liu, F. Bureš, Z. Jiang: *RSC Advances* **2014**, *4*, 30062.

5Po04

VPLYV PRÍTOMNOSTI ALFA-HYDROXYSKUPINY NA PRIEBEH DOMINO PALÁDIOM(II)-KATALYZOVANEJ CYKLIZÁCIE A HECKOVEJ VINYLÁCIE

Jana Doháňošová¹, Angelika Lásiková², Tibor Gracza²

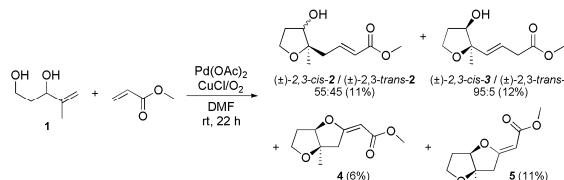
¹Centrálne laboratóriá, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava

jana.dohanosova@stuba.sk

²Oddelenie organickej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava

Oxypaladačné reakcie 1,4-alkenolov vedú k vzniku σ -tetrahydrofuranypaládnatých intermediátov, ktoré môžu byť za účelom predlžovania uhlíkového reťazca vychytávané alkénmi v prípade, že sa zabráni nežiaducej β -hydridovej eliminácii [1].

V prítomnosti voľnej α -hydroxyskupiny poskytuje modelový 4-metylpent-4-én-1,3-diol (**1**, Obr. 1) 2,2,3-trisubstituované tetrahydrofurány **2** so zdanlivo nízkou diastereoselektivitou [2]. 2,3-*cis*-Produkt **2** však podlieha ďalším následným reakciám za vzniku tetrahydrofuránu **3** a bicyckých štruktúr **4** a **5**.



Obr. 1. Domino Pd(II)-katalyzovaná cyklizácia a Heckova vinylácia substrátu **1**.

V prezentovanej krátkej štúdií sme sa zamerali na vplyv ochránenia α -hydroxyskupiny na diastereo- a chemoselektivitu uvedených domino cyklizácií, pričom sa skúmal tiež vplyv použitého vinylačného partnera na potlačenie nežiaducej izomerizácie dvojitej väzby.

Autori za finančnú podporu ďakujú Vedeckej grantovej agentúre MŠVVaŠ SR a SAV (1/0488/14 a 1/0770/15) a Agentúre na podporu výskumu a vývoja (APVV-14-0147).

- [1] Semmelhack, M. F.; Epa, R. W. *Tetrahedron Lett.* **1993**, 34, 7205-7208.
- [2] Lásiková, A.; Doháňošová, J.; Hlavínová, L.; Toffano, M.; Vo-Thanh, G.; Gracza, T. *Tetrahedron: Asymmetry* **2012**, 23, 818-827.

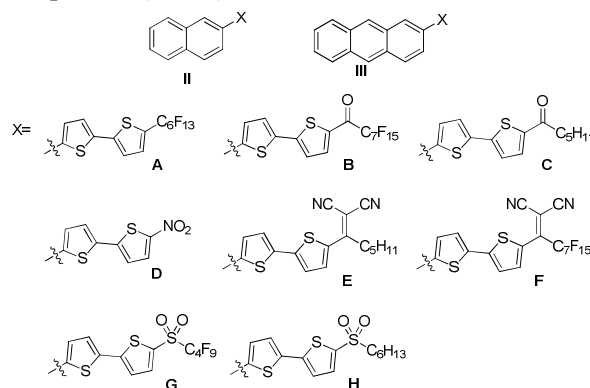
5Po05

SYNTÉZA OLYGOTIENYL-ACÉNOVÝCH DERIVÁTOV S ELEKTRÓNAKCEPTORNÝMI RAMIENKAMI AKO POTENCIÁLNYCH POLOVODIČOV N-TYPU

Lucia Feriancová, Martin Putala

Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Ilkovičova 6, 841 04 Bratislava
feriancova13@uniba.sk

Štúdium nízkomolekulových organických polovodičových materiálov v poslednej dobe púta veľkú pozornosť z dôvodu ich širokého uplatnenia v rôznych sférach [1]. Celkový vývoj polovodičov n-typu však stále zaostáva za polovodičmi p-typu. Vzhľadom na dopyt po týchto materiáloch a na základe úspešne pripravených derivátov p-typu v našej skupine [2] bola navrhnutá séria oligotienyl-acénových derivátov **II/IIIA-H** s elektrónakceptornými skupinami (obr. 1).



Obr. 1. Navrhnuté deriváty s potenciálnymi polovodičovými vlastnosťami n-typu.

Pripravené boli naftalénové a antracénové deriváty s perfluoracylovým (**II/IIIB**), perfluoralkylovým (**II/IIIA**), acylovým (**II/IIIC**), nitro (**II/IIID**) a dikyanovinylým (**IIIE**) ramienkom použitím Suzukiho resp. Negishiho reakčných podmienok. Pripravené deriváty boli charakterizované UV/VIS spektrometriou a cyckickou voltametrou a tieto hodnoty boli porovnané s teoretickými výpočtami DFT metódou. Experimentálne stanovené hodnoty korelujú s trendom teoreticky vypočítaných hodnôt. Z doposiaľ zistených výsledkov sa ako najvhodnejší ukázal pripravený derivát **IIIE** s antracénovým jadrom s naviazanou dikyanovinylou skupinou.

- [1] Yamashita, Y. *Sci. Technol. Adv. Mater.* **10**, 1-9 (2009).

- [2] Filo, J.; Mišicák, R.; Cigán, M.; Weis, M.; Jakabovič, J.; Gmucová, K.; Pavúk, M.; Dobročka, E.; Putala, M. *Synth. Met.* **202**, 73–81 (2015).

5Po06

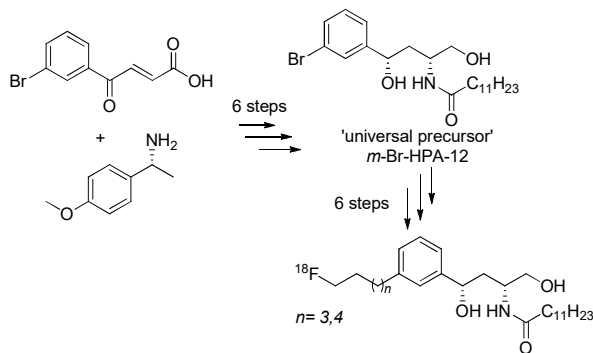
FLUORINATED CERAMIDE TRAFFICKING INHIBITORS AS ALZHEIMER'S DISEASE RADIOMARKERS

Branislav Ferko¹, Dušan Berkeš¹, Simone M. Crivelli²

¹Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava, Slovak Republic branislav.ferko@stuba.sk

²Maastricht University, Department of Psychiatry and Neuropsychology, School for Mental Health and Neuroscience, Maastricht, The Netherlands

Accumulation of ceramides leads to a different type of diseases [1]. Nowadays, it is known that Alzheimer's disease (AD) patients have increased levels of ceramides in blood and brain tissue [2]. Ceramide transfer protein (CERT) mediates the transfer of ceramides from endoplasmic reticulum to the Golgi apparatus, where the synthesis of complex sphingolipids occurs. Since the discovery of CERT-transfer machinery, the family of HPA-12 (*N*-(3-hydroxy-1-hydroxymethyl-3-phenylpropyl)dodecanamides) were described as the first and to date unique inhibitors of this transport [3]. To better understand the role of ceramides and CERT protein in AD, positron emission tomography (PET) imaging can be a useful tool. Herein, we describe the synthesis of the most potent analogues of HPA-12 radiolabeled with fluorine-18 from the universal precursor *m*-Br-HPA-12. The enantioselective access to this precursor is based on a practical and reliable crystallization induced asymmetric transformation (CIAT) of 3-Bromo-benzoylacrylic acid and suitable chiral auxiliary. Incorporation of alkynol chains was accomplished by Sonogashira coupling, followed by triple bond reduction and protection of primary hydroxyl group delivering the intermediates for the radiofluorinated analogues of HPA-12. Radiofluorination of analogues of HPA-12 and PET imaging was carried out by our partners at University of Maastricht.



The authors gratefully thank the Grant Agencies (ZonMw Memorabel program (project No: 733050105), APVV, project No. APVV-16-0258).

- [1] a) K. Yuyama, S. Mitsutake, Y. Igarashi, *Biochim. Biophys. Acta, Mol. Cell. Biol. Lipids* **2014**, 1841, 793-798; b) C. Mencarelli, P. Martinez–Martinez, *Cell. Mol. Life Sci.* **2013**, 70, 181-203.
 [2] a) M. M. Mielke, V. V. R. Bandaru, N. J. Haughey, J. Xia, L. P. Fried, S. Yasar, M. Albert, V. Varma, G. Harris, E. B. Schneider, *Neurology* **2012**, 79, 633-641; b) X. He, Y. Huang, B. Li, C.-X. Gong, E. H. Schuchman, *Neurobiol. Aging* **2010**, 31, 398-408; c) V. Filippov, M. A. Song, K. Zhang, H. V. Vinters, S. Tung, W. M. Kirsch, J. Yang, P. J. Duerksen-Hughes, *J. Alzheimers Dis.* **2012**, 29, 537-547.
 [3] a) K. Hanada, K. Kumagai, S. Yasuda, Y. Miura, M. Kawano, M. Fukasawa, M. Nishijima, *Nature* **2003**, 426, 803-809; b) S. Yasuda, H. Kitagawa, M. Ueno, H. Ishitani, M. Fukasawa, M. Nishijima, S. Kobayashi, K. Hanada, *J. Biol. Chem.* **2001**, 276, 43994-44002.

5Po07

SYNTHESIS AND ANTIMYCOBACTERIAL ACTIVITY OF SUBSTITUTED *N*-PHENYL-1-HYDROXYNAPHTHALENE-2-CARBOXAMIDES

Tomáš Goněc¹, Šárka Pospíšilová², Michnová², Jiří Kos³, Alois Čížek², Josef Jampílek³

¹Department of Chemical Drugs, Faculty of Pharmacy, University of Veterinary and Pharmaceutical Sciences Brno, Palackého 1, 612 42 Brno, Czech Republic, t.gonec@seznam.cz

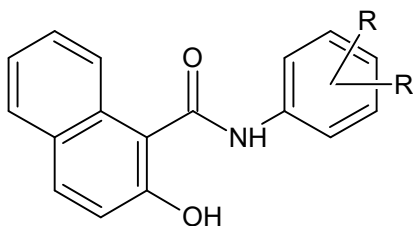
²Department of Infectious Diseases and Microbiology, Faculty of Veterinary Medicine, University of Veterinary and Pharmaceutical Sciences Brno, Palackého 1, 612 42, Brno, Czech Republic

³Department of Pharmaceutical Chemistry, Faculty of Pharmacy, Comenius University, Odbojarov 10, 832 32 Bratislava, Slovakia

In spite of the approval of some new antituberculosis drugs, such as bedaquillin or delamanid, tuberculosis (TB) now ranks alongside human immunodeficiency virus as a

leading cause of deaths worldwide. Based on the newWorld Health Organization tuberculosis report, TB killed 1.5 million people in 2014 worldwide; 9.6 million people are estimated to have fallen ill with TB in 2014. As estimated, 480,000 cases of multidrug-resistant TB (MDR-TB) occurred in 2014. The emergence of MDR-TB makes the discovery of new molecular scaffolds a priority to achieve effective control of the disease. [1]

The aim of recent work was to synthesize series of *N*-(phenyl)-1-hydroxynaphthalene-2-carboxamides with multiple substitution on phenyl ring (Fig. 1). 30 compounds with halogen, trifluoromethyl, methyl, methoxy and nitro substituted anilide ring were prepared according to well approved microwave-assisted synthetic method. [2] The identities of compounds were confirmed by ^1H and ^{13}C NMR, HRMS and IR spectroscopy. Primary *in vitro* screening of the synthesized compounds was performed against *Mycobacterium marinum*, *Mycobacterium kansasii* and *Mycobacterium smegmatis*. Four of novel compounds showed better antimycobacterial activity than standards Pyrazinamide and Rifampicine.



R: -Me, -OMe, -F, -Cl, -Br, -CF₃, -NO₂

Figure 1. Substituted *N*-(phenyl)-1-hydroxynaphthalene-2-carboxamides.

- [1] Global Tuberculosis Report: World Health Organisation (2015)
[2] Gonč, T. et al. Molecules 18 (2013) 9397-9419

5Po08

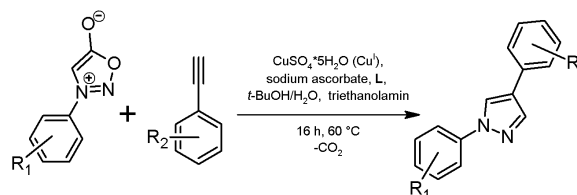
VLIV SUBSTITUCE NA 1,3-DIPOLÁRNÍ CYKLOADICI ARYLSYDNONŮ S ARYLACETYLENY

Veronika Hladíková¹, Jiří Hanusek¹

¹ Univerzita Pardubice, Fakulta Chemicko-technologická, Ústav Organické Chemie, Studentská 573, 532 10 Pardubice, st27004@student.upce.cz

1,3-Dipolární cykloadice sydnonů s alkyne byla intenzivně studována již od svého objevení Huisgenem [1] v roce 1962. Reakce byla původně provedena za drsných podmínek (tj. vysoká teplota) a poskytovala směs pyrazolů [2]. Při

použití katalyzátoru lze za mírnějších podmínek získat pouze jeden regioisomer. Tento postup zahrnující katalýzu mědi popsal nedávno Kolodych a spol [3] a jedná se o regioselektivní cykloadici poskytující vyšší výtěžky. Dosud nebyla publikována žádná kinetická studie popisující tuto reakci a proto jsme provedli HPLC kinetickou studii Cu-katalyzované cykloadice *N*-arylsydnonů s terminálními arylacetyleny (CuSAC). Rychlost reakce byla měřena za různých podmínek a bylo zjištěno, že je závislá na počáteční koncentraci *N*-arylsydnonu, ale nezávislá na počáteční koncentraci arylacetyleny. Rychlost reakce závisí i na množství mědi a také množství a struktuře ligandu. Bylo zjištěno, že polární efekty substituentů ovlivňují rychlost reakce ve smyslu urychlení pro elektrondonorní substituenty a zpomalení pro elektronakceptorní (srovnáno s H).



Obr. 1.

- [1] Huisgen R., Grashley R., Gotthardt H., Smidt R., *Angew.Chem. Int.Ed.*, **1962**, 1, 48.
[2] Browne D. L., Helm M. D., Plant A., Harrity J. P. A., *Angew Chem.*, **2007**, 119, 8810-8812.
[3] Kolodych S., Rasolofonjatovo E., Chaumontet M., Nevers M.C., Créminon, Taran F., *Angew. Chem.Int.Ed.*, **2013**, 52, 12056-12060.

5Po09

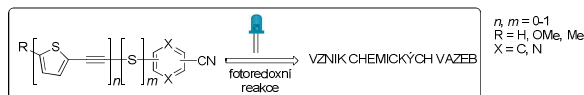
ORGANICKÉ PUSH-PULL CHROMOFORY PRO FOTOREDOX KATALÝZU

Zuzana Hloušková¹, Filip Bureš¹

¹Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika zuzana.hlouskova@student.upce.cz

V průběhu posledního desetiletí se fotoredox katalýza znovu infiltrovala do oblasti organické a materiálové chemie jako jedinečný nástroj ke tvoření nových chemických transformací. Využívá energie získané absorpcí viditelného záření, a tím zprostředkovává fotoredoxní reakce, které obecně probíhají za mírných podmínek a s nižším dopadem na životní prostředí. Fotoredoxní katalyzátor je obecně schopen transformovat sluneční energii na energii chemických vazeb a fotoredoxní reakce reakce tak můžeme považovat za atraktivní alternativu

ke známým a zavedeným organickým reakcím [1]. V roce 2012 byl v naší pracovní skupině vyvinut velice efektivní fotokatalyzátor na bázi pyrazin-2,3-dikarbonitrilu substituovaného v polohách 4 a 5 5-methoxythiofen-2-yl substituenty [2]. Tento katalyzátor se ukázal jako velice účinný v cross-dehydrogenativním couplingu (CDC), využívající *N*-aryl-tetrahydroisochinolinů a niroalkanů [3]. Tyto povzbudivé výsledky nás vedly k provedení dalších strukturních obměn již známého katalyzátoru s cílem efektivně využít celé viditelné spektrum světla (bathochromní posun absorpčního maxima/hrany) a minimalizovat energetický rozdíl hladin HOMO a LUMO. Strukturní změny jsou prováděny jednak na akceptorní části (akceptor = pyrazin- a pyridin(di)karbonitrily) a rovněž změnou délky a složení π -konjugované cesty (2,5-thienyl v kombinaci s násobnými vazbami). Jako donor elektronů byla využita methoxy nebo thiomethyl skupina. Obrázek 1 zobrazuje obecnou strukturu nově vyvíjených fotoredox katalyzátorů ve tvaru písmene X nebo Y. V příspěvku budou diskutovány především syntetické cesty vedoucí k těmto sloučeninám.



Obr. 1. Obecná struktura fotokatalyzátoru a jeho využití ve fotoredox reakci.

- [1] N. A. Romero, D. A. Nicewicz, *Chem. Rev.* **2016**, 116, 10075
- [2] Y. Zhao, C. Zhang, K. F. Chin, O. Pytela, G. Wie, H. Liu, F. Bureš, Z. Jiang, *RSC Advances* **2014**, 4, 30062.
- [3] X. Liu, X. Ye, F. Bureš, H. Liu, Z. Jiang, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, 54, 11443.

5Po10

SYNTEZA A *IN VITRO* BIOLOGICKÉ STUDIE *N*-CYKLOALKYLKARBAMÁTŮ

Eva Horáková¹, Pavel Drabina¹, Katarína Vorčáková², Šárka Štěpánková², Lenka Brůčková², Miloš Sedlák¹

¹ Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika, eva.horakova@student.upce.cz

² Katedra biologických a biochemických věd, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika

Alzheimerova choroba (AD) je progresivní, neurodegenerativní onemocnění mozku s charakteristickými klinickými a patologickými

symptomy. Přesná příčina vzniku AD není dosud známá. Uvádí se, že touto chorobou v současnosti trpí asi 6 % světové populace starší 65-ti let. Jedním z klinických příznaků AD je snížená koncentrace acetylcholinu (ACh) v cholinergních synapsích. Významnou roli při léčbě AD proto hraje inhibice cholinesteráz (ChE). Mezi účinné pseudo-reverzibilní inhibitory acetylcholinesterázy (AChE) resp. butyrylcholinesterázy (BChE) patří mimo jiné rovněž vhodně substituované karbamáty. [1, 2] Jedním ze schválených léčiv AD je právě karbamát Rivastigmin (Exelon®).

V předchozí studii jsme připravili serii *O*-substituovaných *N*-2-fenylcyklopropylkarbamátů, které jsme testovali jako potencionální inhibitory cholinesteráz. Většina z karbamátů vykazovala vyšší nebo srovnatelnou inhibiční aktivitu než Rivastigmin. [3] V této práci jsme modifikovali strukturu těchto karbamátů a studovali vliv provedených strukturních změn na inhibiční aktivitu a cytotoxitu. V rámci série jsme připravili karbamáty odvozené od 2-fenylcyklopropan-1-aminu, 2-(4'-halogen)fenylcyklopropan-1-aminu, 1-fenylcyklopropan-1-aminu, 3-fenylcyklobutan-1-aminu and 1-fenylcyklobutan-1-aminu. Tyto karbamáty vykazovaly inhibiční aktivitu vůči AChE v rozmezí hodnot IC_{50} : 36 – 85 $\mu\text{mol}\cdot\text{l}^{-1}$ resp. pro BChE (IC_{50} : 9 – 215 $\mu\text{mol}\cdot\text{l}^{-1}$). Cytotoxicita nově připravených karbamátů je pak výrazně nižší než cytotoxicita karbamátů studovaných v předchozí práci [3].

- [1] Clive Ballard, Serge Gauthier, Anne Corbett, Carol Brayne, Dag Aarsland, Emma Jones: *Lancet* (2011), 377, 1019.
- [2] Efrat Groner, Yacov Ashani, Donna Schorer-Apelbaum, Jeffrey Sterling, Yaacov Herzig, Marta Weinstock: *Mol. Pharmacol.* (2007) 71, 1610.
- [3] Eva Horáková, Pavel Drabina, Břetislav Brož, Šárka Štěpánková, Katarína Vorčáková, Karel Královec, Radim Havelek, Miloš Sedlák: *J. Enzyme Inhib. Med. Chem.* (2016) 31:sup3, 173.

5Po11

QUINAZOLINONE SCHIFF BASES AS POTENTIAL ANTICANCER AGENTS: SYNTHESIS, SPECTROSCOPIC PROPERTIES AND BIOLOGICAL EVALUATION

Michal Hricovíni¹ Katarína Kozics² Annamária Srančíková² and Zuzana Hricoviniová^{3*}

¹*Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Bratislava, SK-812 37 Bratislava*

²*Cancer Research Institute, BMC Slovak Academy of Sciences, Bratislava, SK-845 05 Bratislava*

³*Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, SK-845 38 Bratislava, Zuzana.Hricoviniová@savba.sk*

Quinazoline and quinazolinone derivatives have been the subject of considerable interest due to their wide range of biological activities and important therapeutic effects [1]. Taking into consideration expanded applications of quinazolinone-based compounds in the field of pharmaceutical chemistry [2] a new series of quinazolin-4-one-derived Schiff bases were designed, synthesized and characterized on the basis of their physical and spectral data. The presented microwave-assisted protocol provides an efficient route for the synthesis of structurally diverse biologically active compounds aiming at potentially useful anticancer agents.

The molecular structures of new Schiff bases were confirmed by various spectroscopic methods (NMR, IR, HRMS) and their antioxidant activities were evaluated by EPR and UV-vis spectroscopy employing 2,2'-azino-bis(3-ethylbenzothiazoline-6-sulphonic acid) (ABTS) assay and 1,1-diphenyl-2-picryl-hydrazyl (DPPH) assay.

New compounds were evaluated for their cytotoxic activity. Cytotoxic effects of different concentrations of Schiff bases (0.5 - 1000 μM) were evaluated in human hepatoma (HepG2) cells by the MTT assay. Most of the tested compounds exhibited significant cytotoxicity against cancer cells. The photoactive properties and biological activity evaluation of new quinazolinone derivatives will be further discussed in our contribution.

This work was supported by the Scientific Grant Agency VEGA of the Slovak Republic (Projects 2/0100/14, 1/0041/15 and 2/0027/16)

[1] M. Demeunynck, I. Baussanne: *Curr. Med. Chem.* 20 (2013) 794.

[2] M. F Ahmed, M. Youns: *Archiv der Pharmazie* 346 (2013) 610.

5Po12

DESIGN A SYNTÉZA BITIOFÉNOVÝCH DERIVÁTOV PRE MODIFIKÁCIU POVRCHU DIELEKTRIKA

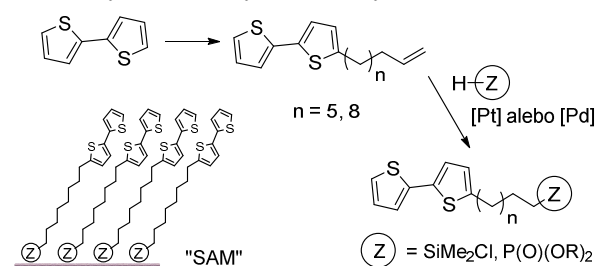
Iveta Kmentová, Lucia Feriancová, Martin Putala

*Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava
iveta.kmentova@gmail.com*

Stratégia funkcionalizácie povrchu použitím techniky samousporiadajúcich sa vrstiev (SAM - self assembled monolayers) predstavuje všestranný prístup k ladeniu elektronických a morfológických vlastností pre rôzne oblasti aplikácie organických materiálov ako sú organických poľom riadené tranzistory (OFET), svetloemitujúce diódy, solárne články či už rôzne biologické a chemické senzory. [1]

Pri konštrukcii OFET sa pre kontrolu hustoty a orientácie vrstvy organických polovodičových materiálov na povrchu dielektrika (oxidu kremičitého) využívajú organické molekuly s dlhým reťazcom a kotviacou skupinou kompatibilnou s chemickou povahou modifikovaného substrátu. [2]

Pre dosiahnutie vyššej zručnosti povrchu dielektrika sme navrhli modifikovať dlhé reťazce bitiofénovými jednotkami, ktoré sú spoločné s následne nanášaným polovodičovým materiálom. Pre samotné ukotvenie na povrch sme pripravené bitiofénové deriváty s dlhými alkylovými ramenkami funkcionalizovali chlórdimetylsilylovou alebo dihydroxyfosforylovou skupinou. Pri ich príprave sme najskôr z bitiofénu pripravili ω-bitienylované alkény, ktoré sme ďalej funkcionalizovali Pt-katalyzovanou hydrosilyáciou, resp. Tanaka-ho Pd-katalyzovanou hydrofosfonyláciou alkénu. [3]



Obr. 1. Schéma syntézy bitiofénových derivátov pre ukotvenie na povrchu dielektrika.

Štruktúrne parametre (bitiofénový fragment, dĺžka alkylového reťazca, kotviaca skupina) a spôsob nanášania SAM z pripravených derivátov môžu výrazne ovplyvniť vlastnosti OFET zariadení. Vytváranie SAM, následná konštrukcia

a charakterizácia OFET zariadení bude testovaná v spolupráci s FEI STU v Bratislave.

- [1] S. Casalini, C. A. Bortolotti, F. Leonardi, F. Biscarini: *Chem. Soc. Rev.* **46**, 40-71 (2017).
- [2] C. Queffelec, M. Petit, P. Janvier, D. A. Knight, B. Bujoli: *Chem. Rev.* **112**, 3777-3807 (2012).
- [3] S. A. Ponomarenko, O. V. Borshchev, T. Meyer-Friedrichsen, A. P. Pleshkova, S. Setayesh, E. C. P. Smits, S. G. J. Mathijssen, D. M. de Leeuw, S. Kirchmeyer, A. M. Muzafarov: *Organometallics* **29**, 4213-4226 (2010).

5Po13

CHEMICKÁ SYNTÉZA PREKURZOROV VHODNÝCH PRE PRÍPRAVU INHIBÍTOROV GLYKOZYLTRANSFERÁZ

Jana Jakubčinová, Ján Hirsch, Igor Tvaroška, Marek Baráth

Slovenská akadémia vied, Chemický ústav, Oddelenie glykomiky, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, janajakubcinova@gmail.com

Glykozylácia je jedným z najvýznamnejších posttranslačných modifikácií proteínov a môže prebiehať pomocou *N*- alebo *O*-glykozylácie. *N*-acetylglukozaminyltransferáza (GlcNAcT) je enzým patriaci medzi glykozyltransferázy a katalyzuje transfer *N*-acetylglukozamínového (GlcNAc) zvyšku na vhodný substrát (najčastejšie iný mono-/oligosacharid, či proteín). Ide o dvojsubstrátové enzýmy, ktoré často vyžadujú aj prítomnosť kovového kofaktora. Výsledkom takto katalyzovanej reakcie je vznik novej glykozidovej väzby [1-3].

Na prípravu inhibítorov sa využíva niekoľko stratégií. Najefektívnejšou je príprava inhibítorov tranzitného stavu (TS; kde sa mimikujú oba substráty, aj vplyv kofaktora). Na základe študovanej literatúry a počítačového modelovania boli navrhnuté štrukturálne motívy mimetik TS. Donorovú časť tvorí základná štruktúra nesúca furanózový skelet - odvodený od príslušnej hexofuranózy (fruktóza, tagatóza, psikóza). Akceptorný substrát je mimikovaný rôzne substituovanou (napr. metyl, etyl, fenyl, benzyl) tioglykozylovou skupinou. Mimikovanie odstupujúcej uridín difosfátovej (UDP) skupiny reprezentuje príslušný ester kyseliny fosforečnej v polohe C-1. Ten po hydrolýze poskytne potrebný záporný náboj.

V príspevku testujeme prípravu odpovedajúcich glykozyl sulfónových derivátov ako možnú náhradu za pôvodné tioglykozylové deriváty, ktoré vykazovali nízku stabilitu. Štruktúra všetkých zlúčenín bola potvrdená NMR a MS.

Táto práca vznikla s finančnou podporou projektu VEGA 2/0024/16.

- [1] Marino, K., Bones, J., Kattla, J. J., Rudd, P. M. *Nat. Chem. Biol.* **2010**, *6*, 713.
- [2] Montreuil J.; Vliegthart J. F. G.; Schachter H. *Glycobiol.* **1995**, *29a*, 50.
- [3] Kleene R.; Berger E. G. *Biochim. Biophys. Acta* **1993**, *1*, 1154, 283-325.

5Po14

DIPOLÁRNÍ CHROMOFORY S π -KONJUGOVANÝM SYSTÉMEM NA BÁZI DIAZINŮ

Milan Klikar¹, Filip Bureš¹, Sylvain Achelle²

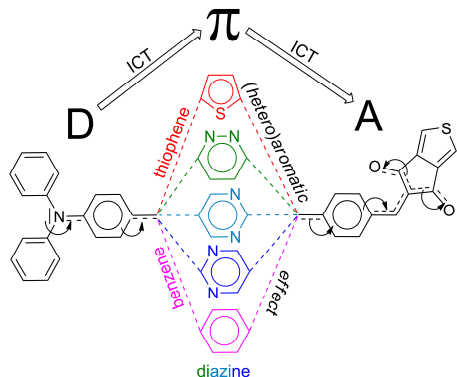
¹Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice

milan.klikar@upce.cz

²Université de Rennes 1, Institut Universitaire de Technologie de Lannion, Edouard Branly 30219, 22302 Lannion Cedex, Francie

Optoelektronické vlastnosti dipolárních push-pull chromoforů mohou být velice jednoduše laděny vhodnou volbou donorních a akceptorních jednotek, avšak díky omezenému počtu D/A jednotek dosáhl tento přístup téměř svého limitu. Daleko širší paleta π -konjugovaných systémů tak nabízí mnohem větší variabilitu pro optimalizování požadovaných vlastností těchto D- π -A systémů. Vhodnou volbou π -konjugovaného systému lze ovlivňovat především vnitřní přenos náboje ICT a dipolární charakter chromoforu a tím cíleně uzpůsobovat jeho elektrochemické a optické vlastnosti.[1] Experimentální i teoretické studie potvrzují, že vnitřní přenos náboje je mimo jiné řízen aromaticitou zvoleného π -systému.[2] Typické push-pull chromofory jsou pak budovány na benzenových a thiofenových π -můstcích, naopak elektronově chudé diazinové cykly se s výhodou využívají jako terminální akceptorní jednotky.[3] Tyto diaziny by však rovněž mohly sloužit právě jako centrální, ICT propustné π -můstky, nicméně tomuto tématu nebyla doposud věnována dostatečná pozornost. Z tohoto důvodu byla připravena ucelená série dipolárních push-pull chromoforů, které obsahují centrální aromatický systém založený nejen na běžném benzenovém a thiofenovém jádře, ale rovněž i na pyridzinu a pyrimidinu (Obr. 1). U těchto nových molekul pak byly zkoumány jejich termální, elektrochemické, lineárně a nelineárně optické vlastnosti, podpořené teoretickými DFT kalkulacemi. Na základě experimentálních dat byl následně diskutován a kriticky porovnán vliv

diazinového π -mústku na optoelektronické vlastnosti týchto chromoforů ve srovnání s benzenovými/thiofenovými analogy.



Obr. 1. Studované chromofory s centrálným (hetero)aromatickým π -konjugovaným systémom.

- [1] F. Bureš, *RSC Advances* **2014**, 4, 58826-58851.
 [2] I. Albert, T. Marks, M. Ratner, *J. Am. Chem. Soc.* **1997**, 119, 6575-6582.
 [3] D. Cvejn, S. Achelle, O. Pytela, J. P. Malval, A. Spangenberg, N. Cabon, F. Bureš, F. Robin-le Guen, *Dyes Pigm.* **2016**, 124, 101-109.

5Po15

APPLICATION OF THE BROOK REARRANGEMENT IN TANDEM WITH SINGLE ELECTRON-TRANSFER OXIDATIVE AND RADICAL PROCESSES

Mikhail Klychnikov¹, Ullrich Jahn¹

¹Institute of Organic Chemistry and Biochemistry of the Czech Academy of Sciences, Flemingovo nám. 2, 16610 Prague, Czech Republic
 mikhail.klychnikov@uochb.cas.cz

The Brook rearrangement is a simple way for the generation of carbanions from alkoxides by migration of a trialkylsilyl group from a carbon atom to the oxygen atom. This rearrangement is widely used in carbanion chemistry [1], but its potential in oxidative settings is untapped.

ω -Epoxy- α -silyl nitriles or esters are good substrates for nucleophilic epoxide opening and subsequent Brook rearrangement [2]. This tandem process is a good way for the preparation of silyl-protected γ -hydroxynitriles. The behavior of epoxides with different electron withdrawing groups and trialkylsilyl groups in these reactions was studied. Influence of different nucleophilic agents and reaction conditions on the epoxide opening and Brook rearrangement will be demonstrated.

The obtained products of this sequence were modified by radical reactions. Radicals can be generated from carbanions by single electron

transfer oxidation [3]. Ferrocenium hexafluorophosphate was used as a oxidant and (2,2,6,6-tetramethylpiperidin-1-yl)oxyl (TEMPO) was chosen as a trapping agent of final radicals. Silyl-protected γ -hydroxynitriles were applied in radical reactions without isolation or after isolation and subsequent deprotonation (Fig. 1). Transformation of acyclic products to cyclic derivatives will be demonstrated.

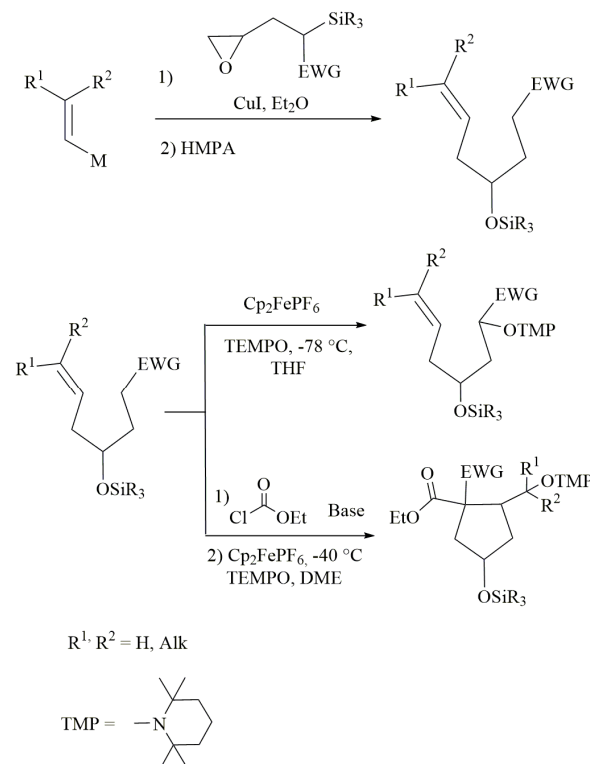


Fig. 1. Tandem nucleophilic substitution / Brook rearrangement / radical reactions.

This work was supported by GAČR (reg. No. 16-18513S) and the Gilead Sciences & IOCB research centre.

- [1] Moser, W. H.: *Tetrahedron*, 57, 2065 (2001)
 [2] Smith, A. B., Kim, D. S., Xian, M.: *Org. Lett.* 9, 17, 3307 (2007)
 [3] Jahn, U., Kafka, F., Pohl, R., Jones, P. G.: *Tetrahedron*, 65, 10917 (2009)

5Po16

VROZENÉ DYSFIBRINOGENEMIE A HYPOFIBRINOGENEMIE V ČR

Roman Kotlín¹, Jana Štikarová¹, Jiří Sutttnar¹, Ondřej Pastva¹, Eliška Ceznerová¹, Peter Salaj¹, Jan Loužil¹, Jan E. Dyr¹

¹Ústav hematologie a krevní transfuze, U nemocnice 1, 128 20 Praha 2
 roman.kotin@uhkt.cz

Fibrinogen je glykoprotein krevní plasmy sestavený ze tří párů různých polypeptidových

řetězců označovaných $\text{A}\alpha$, $\text{B}\beta$ a γ . Fibrinogen hraje klíčovou úlohu v hemokoagulaci.

Vrozené poruchy v některém z genů pro řetězce fibrinogenu mohou vést k vzácným onemocněním – dysfibrinogenemii, hypofibrinogenemii či afibrinogenemii. V případě dysfibrinogenemii jde o kvalitativní poruchu, v případě hypofibrinogenemii a afibrinogenemii se jedná o poruchu kvantitativní.

Výzkumem vrozených dysfibrinogenemii a hypofibrinogenemii se zabýváme již od roku 2005. Za tu dobu jsme vyšetřili více než 90 pacientů se suspektní dysfibrinogenemii či hypofibrinogenemii. Vrozenou mutaci se nám podařilo odhalit u 48 rodin. U jednoho pacienta jsme našli afibrinogenemii způsobenou homozygotní mutací $\text{A}\alpha$ 6477 delA. Dále se nám podařilo zjistit 19 případů hypofibrinogenemie a 28 případů dysfibrinogenemie. Nejvíce záměn jsme odhalili v $\text{A}\alpha$ řetězci – 30 případů, dále v γ řetězci – 10 případů a nejméně časté jsou mutace v $\text{B}\beta$ řetězci – 8 případů. Nejčastěji se v české populaci vyskytuje záměna v $\text{A}\alpha$ řetězci na pozici 16 – celkem 11 nepříbuzných rodin.

U zjištěných případů jsme provedli také biochemickou analýzu – polymeraci fibrinu, fibrinolýzu, kinetiku odštěpování fibrinopeptidů, studium morfologie sítě a proteomickou analýzu.

Tato práce vznikla za podpory grantů Ministerstva Zdravotnictví ČR pro konceptuální rozvoj číslo 00023736, grantem GAČR P205/12/G118 a grantem ERDF OPVK CZ.2.16/3.1.00/28007.

5Po17

SYNTÉZA ANTIMYKOBAKTERIÁLNĚ ÚČINNÝCH MOLEKUL VHODNÝCH PRO KONJUGACI S PEPTIDOVÝMI DRUG DELIVERY SYSTÉMY

Martin Krátký¹, Jiřina Stolaříková², Jarmila Vinšová

¹Univerzita Karlova, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Akademiya Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, martin.kratky@faf.cuni.cz

²Zdravotní ústav se sídlem v Ostravě, Partyzánské náměstí 7, 702 00 Ostrava

Tuberkulóza je infekční onemocnění způsobené *Mycobacterium tuberculosis*, jehož léčba stále není celosvětově uspokojivě vyřešena, zejména kvůli koincidenci s HIV, výskytu rezistentních kmenů a latentní formy [1]. Výzkum v oblasti léčby TB je proto jednou z priorit WHO.

Netoxické a biodegradabilní oligopeptidové drug delivery systémy (DDS) na bázi tuftsinu ([TKPKG]_n) působí imunostimulačně, specificky

„cíli“ do makrofágů, zlepšují rozpustnost, snižují toxicitu, zvyšují buněčný uptake a tím i intracelulární působení navázaných malých antimykobakteriálně účinných molekul. Tento koncept byl úspěšně ověřen u isoniazidu [1], antituberkulotika první linie, a našich salicylanilidových derivátů [2]. Jako můstek spojující peptid s účinnou molekulou byla zvolena oximová vazba, která je stabilní při pH 3–8 [1], další navržené jsou např. karboxamidová, thioetherová, iminová či močovinová vazba.

Jednokrokovými strukturními obměnami jsme připravili celou řadu různě substituovaných derivátů zavedených antituberkulotik první i druhé linie (isoniazid, *para*-aminosalicylová kyselina, cykloserin, fluorochinolony) a neklasických antimykobakteriálně účinných léčiv (sulfonamidy, triklosan) tak, aby byly strukturně vhodné pro potenciální konjugaci s peptidovými DDS. K modifikacím těchto výchozích molekul byly použity např. kyseliny pyrohroznová, glyoxalová, 4-formylbenzoová, ω -chloralkylisokyanáty či anhydridy dvojsytných kyselin (jantarová, itakonová).

Připravené deriváty malých molekul jsou testovány *in vitro* vůči *Mycobacterium tuberculosis*, podle jeho výsledků budou na oligotuftsinnové nosiče navázány ty nejaktivnější z nich.

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 17-27514Y.

- [1] Kata Horvati, Gabor Mezo, Nora Szabo, Ferenc Hudecz, Szilvia Bösze: J. Pept. Sci., (2009)
- [2] Zsuzsa Baranyai, Martin Krátký, Rudolf Vosátka, Eleonóra Szabó, Zsuzsanna Senoner, Sándor Dávid, Jiřina Stolaříková, Jarmila Vinšová, Szilvia Bösze: Eur. J. Med. Chem., (2017)

5Po18

ŠTÚDIUM VPLYVU ORGANOKATALYZÁTOROV NA IRELANDOV A JOHNSONOV-CLAISENOV PREŠMYK

Dominika Krištofiková¹, Mária Mečiarová¹, Radovan Šebesta¹

¹Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra organickej chémie, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava 4, Slovenská republika; domisk12@gmail.com

Irelandov-Claisenov a Johnsonov-Claisenov prešmyk sú metódy prípravy γ,δ -nenasýtených karboxylových kyselín, resp. ich esterov ako prekursorov biologicky účinných látok. V súčasnosti je známy organokatalytický

Claisenov prešmyk, ktorý bol opísaný v prácach Jacobsena [1,2]. Cieľom práce bolo študovať možnosti katalýzy Irelandovho-Claisenovho (schéma 1) a Johnsonovho-Claisenovho prešmyku (schéma 2) organokatalyzátormi, najmä chirálnymi tiomočovínami a skvaramidmi, ktoré aktivujú substráty tvorbou vodíkových väzieb.

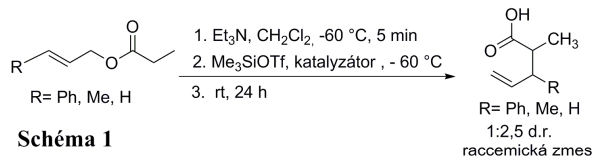


Schéma 1

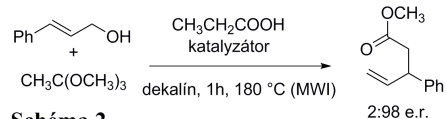


Schéma 2

Za finančnú podporu ďakujeme grantovej agentúre APVV, grant číslo APVV-15-0039.

[1] Jacobsen, E. N.; Uyeda, Ch. *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 5062-5075.

[2] Jacobsen, E. N.; Rötheli, A. R.; Uyeda, Ch. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2010**, *49*, 9753-9756.

5Po19

Pd-CATALYSED CARBONYLATIONS IN MICRO-FLOW SYSTEM

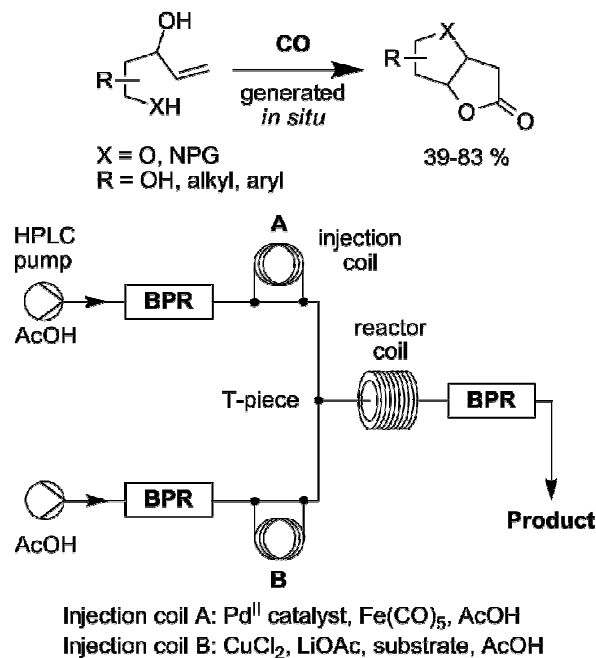
Pavol Lopatka¹, Martin Markovič¹, Peter Kooš¹, Tibor Gracza¹

¹Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava, Slovak Republic, pavollopotka@gmail.com

The carbonyl functionality is found in countless modern pharmaceuticals, as well in many natural products. Installation of carbon monoxide from different sources into organic molecules is therefore an important field of research with broad applicability and impact [1]. Flow chemistry has established itself as a new enabling technology for chemical synthesis. The key principle of flow chemistry is that reaction mixture pass continuously through a relatively small reaction space (only a tiny portion of the total reaction mixture is being processed at any instant). Compared with batch mode processes, this can often provide a number of benefits [2].

We developed a general method for Pd-catalysed oxycarbonylations of unsaturated (amino)alcohols with *in situ* generation of carbon monoxide in flow. By using a simple and compatible reaction conditions [3], iron pentacarbonyl ($\text{Fe}(\text{CO})_5$) can be conveniently transformed into CO molecules which then directly saturate the reaction stream. Simple flow system allows the generation and use of CO without any special need for expensive

equipment. Various bicyclic lactones were successfully performed in flow using near stoichiometric amount of CO.



Scheme 1. Pd-catalysed oxycarbonylations in micro-flow system.

The authors thank the Slovak Grand Agencies (VEGA No. 1/0488/14, APVV-14-0147, ASFU, Bratislava, ITMS projects No. 26240120001, 26240120025) and STU Grant Scheme for Support of Young Researchers for financial support.

[1] T. Morimoto, K. Kakiuchi, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2004**, *43*, 5580-5588.

[2] J. Wegner, S. Ceylan, A. Kirschning, *Chem. Commun.* **2011**, *47*, 4583-4592.

[3] M. Babjak, M. Markovič, B. Kandriková, T. Gracza, *Synthesis* **2014**, *46*, 809-816.

5Po20

APPLICATION OF HIGHLY SYN-STERESELECTIVE 1,3-DIPOLAR CYCLOADDITION OF FIVE-MEMBERED CYCLIC NITRONES IN THE SYTHESIS OF HYACINTHACINES

Tomáš Malatinský¹, Róbert Fischer¹

¹Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, tomas.malatinsky@gmail.com

Polyhydroxylated pyrrolizidine alkaloids called hyacinthacines are an important class of naturally occurring iminosugars that possess significant biological activity [1]. Stereoselective 1,3-dipolar cycloaddition is a powerful tool for their synthesis, however with excellent *anti*-selectivity

and only with moderate *syn*-selectivity depending on the configuration of cyclic nitron used [2].

We were the first, who reported on surprisingly *syn*-stereoselective 1,3-dipolar cycloaddition of *D*-*talo*-nitron **1** with vinyl acetate. Based on this result, we have examined its stereoselective behaviour in cycloaddition reactions with various dipolarophiles and found out that the observed high *syn*-stereoselectivities resulted from the unique spatial orientation of the dioxolane substituent attached to C-5 of the nitron ring [3].

Therefore we decided to develop a new synthetic methodology for the synthesis of hyacinthacines, applying such highly *syn*-stereoselective 1,3-dipolar cycloaddition of nitron **1** with bulky vinylene carbonate (Fig. 1). In this report, we describe interesting synthetic approach towards *ent*-hyacinthacine C₃ (**3**). Natural hyacinthacine C₃ (**5**) would be accessible *via* the same synthetic path starting from enantiomeric *L*-*talo*-nitron **4**.

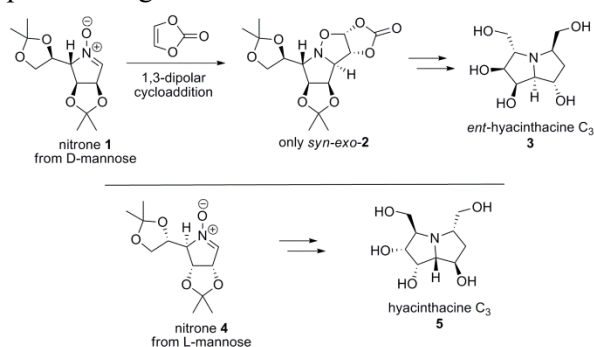


Fig. 1. Synthesis of hyacinthacines.

The authors gratefully thank the Slovak Grant Agencies (APVV, project No. APVV-14-0147; VEGA, project No. 1/0488/14 and ASFEU, Bratislava, ITMS project No. 26240120001, 26240120025).

- [1] Robert J. Nash, Atsushi Kato, Chu-Yi Yu, George W. J. Fleet: *J. Future Med. Chem.* **3**, 1513 (2011).
- [2] Alberto Brandi, Francesca Cardona, Stefano Cicchi, Franca M. Cordero, Andrea Goti: *Chem. Eur. J.* **15**, 7808 (2009).
- [3] Tomáš Malatinský, Mária Spišáková, Matej Babjak, Jana Doháňošová, Jaromír Marek, Ján Moncol, Róber Fischer: *Eur. J. Org. Chem.* **1086** (2017).

5Po21

PYRAZINACENY, AZA-ANLOGY ACENŮ

David Miklík^{1,2}, Jonathan Patrick Hill², Filip Bureš¹

¹Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, davmiklik@gmail.com

²WPI Center for Materials Nanoarchitectonics, National Institute for Materials Science, Namiki 1-1, Tsukuba, Ibaraki 305-0044, Japan.

Aceny, zejména pentacen, stále přitahují mimořádnou pozornost díky širokému spektru uplatnění v oblasti materiálové chemie. Proběhla celá řada studií zabývajících se p-typem polovodivými vlastnostmi pentacenu^[1], přestože je jakožto mimořádně elektron bohatá struktura nestabilní vůči oxidaci na svoji 6,13-chinonovou formu. Jednou z možností stabilizace pentacenu je zavedení heteroatomů do jeho skeletu, což vede nejen ke stabilizaci, ale také k dalším vylepšení vlastností jako jsou vyšší rozpustnost, mezomorfismus, tautomerie redukované formy a v neposlední řadě usnadnění syntézy.^[2]

Tato práce byla zaměřena na rozvoj metod přípravy sloučenin se skeletem skládajícím se pouze z anelovaných pyrazinových kruhů. Zejména pak na přípravu decaaza-analogu pentacenu. Tato objevená snadno adaptabilní metoda může být použita pro přípravu celé řady symetrických i asymetrických derivátů obsahujících decaazapentacenové jádro. Deriváty obsahující tento vysoce elektron-deficitní motiv jsou považovány za slibné adepty pro aplikace v polovodičových technologiích typu n.^[3]

Decaazapentacen a jeho dihydroanalog vykazují celou řadu zajímavých vlastností. Na povrchu Cu (111) zkoumané pomocí STM vykazuje schopnost termálně indukovaného samouspořádávání. UV-Vis spektroskopická titrace (báze, kyselina) dokazuje 5 stabilních forem látky s různými $\lambda_{\max}$, čehož by mohlo být využito například v pH-senzorech. VT-NMR spektroskopie zase odhaluje 3 a více stabilních tautomerů.

I would like to thank to Hill-san who gave me an opportunity to work in his group and for all his support.

- [1] Hagen Klauk, Marcus Halik, Christine Dehm *Appl. Phys. Lett.* **2003**, *82*, 4175–4177.
- [2] Gary J. Richards, David Miklík, Jonathan P. Hill *J. Mater. Chem. C* **2016**, *4*, 11514–11523.
- [3] Gary J. Richards, Jonathan P. Hill, Katsuhiko Ariga *J. Org. Chem.* **2009**, *74*, 8914–8923.

5Po22

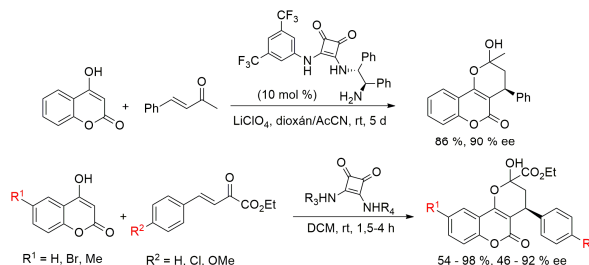
ENANTIOSELEKTÍVNA SKVARAMIDMI KATALYZOVANÁ MICHAELOVA ADÍCIA 4-HYDROXYKUMARÍNU NA AKTIVOVANÉ ALKÉNY

Viktória Modrocká, Eva Veverková, Radovan Šebesta

Katedra organickej chémie, Prírodovedecká fakulta
Univerzity Komenského, Mlynská dolina CH-2,
Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava,
viktoria.modrocka@gmail.com

Kumarínové deriváty sú súčasťou mnohých prírodných látok a používajú sa ako univerzálne intermediáty v ich syntéze.[1] Ich bioaktivita je rozmanitá, dosiaľ sa dokázala antibiotická, antikoagulačná a anti-HIV aktivita.[2] Napríklad, známy antikoagulant warfarín, inhibuje vitamín K epoxid reduktázu, čo má za následok zamedzenie procesu zrážania krvi.[3] Hoci sa toto liečivo predáva vo forme racemátu, aktivita aj metabolizmus jednotlivých enantiomérov sú odlišné. Z tohto dôvodu je dôležité, aby sa vyvinuli asymetrické metódy syntézy enantioméne obohatených derivátov kumarínu.

Jednu z možností ich prípravy predstavuje organokatalytická Michaelova adícia 4-hydroxykumarínu na elektrónovo deficitnú dvojité väzbu α,β -nenasýtených karbonylových zlúčenín a ich derivátov. V našej práci sa študovala Michaelova adícia 4-hydroxykumarínu na benzylidénacetón, katalyzovaná rozličnými skvaramidovými katalyzátormi. Produkt - liečivo (*S*)-warfarín sa získal v 86 % výťažku a vysokom 90 % enantiomérom nadbytku. Taktiež sa preskúmala reakcia 4-hydroxykumarínu s ďalším vhodným elektrofilom - (*E*)-etylsterom kyseliny 2-oxo-4-fenylbut-3-énovej, ktorej produkty sú zlúčeniny s potenciálnou antikoagulačnou aktivitou. V tejto reakcii sa otestovala efektivita homogénnych aj imobilizovaných skvaramidových katalyzátorov, pričom najúčinnější homogénny skvaramid poskytol produkt reakcie vo vysokom 95 % výťažku a 90 % ee. Okrem toho sa rozšírila aj substrátová škála (deriváty kumarínu aj esteru) a produkty sa získali v takmer kvantitatívnych výťažkoch (94-98 %) s enantiomérom nadbytkami 58-90 %.



Obr. 1. Michaelove adície 4-hydroxykumarínu na aktivované alkény.

- [1] Fylaktakidou, K. C.; Hadjipavlou, D. J.; Litinas, K. E.; Nicolaides, D. N. *Curr. Pharm. Des.* **2004**, *10*, 3813-3833.
- [2] Jung, J.-C.; Park, O.-S. *Molecules* **2009**, *14*, 4790-4803.
- [3] Ufer, M. *Clin. Pharmacokinet.* **2005**, *44*, 1227-1246.

5Po23

NEW METHODOLOGY FOR THE SYNTHESIS OF ALFAPROSTOL KEY INTERMEDIATES VIA STILLE COUPLING

Sara Monteiro¹, Aleš Imramovský¹, Karel Pauk¹,
Radka Pavelová², Jan Pavlík²

¹ University of Pardubice, Faculty of Chemical Technology, Institute of Organic Chemistry and Technology, Studenská 573, 532 10 Pardubice, Czech Republic, st50369@student.upce.cz

² Cayman Pharma, ul. Ke Spolaně, 277 11 Neratovice, Czech Republic

Prostaglandins are well known compounds for their several biological activities including control of blood pressure, digestion or reproduction. Several prostaglandins analogues are currently approved for the use in human (e.g. latanoprost) and veterinary (e.g. alfaprostol) clinical conditions.

Application of modern synthetic methods is one option for the synthesis optimization of these known molecules which present several chiral centers and in general a complex multistep synthesis [1]. Current efforts of our group are being target in the development of a new synthetic approach of alfaprostol ω -chain holding a triple bond in C13 position (PG numbering).

The synthesis should be performed using Corey lactone derivative as starting material through the formation of a new C-C bond. In this context, the use of a Sonogashira coupling as well as a Stille coupling have been studied. While the first fail to provide the desired final molecule, the Stille coupling have proved to be an adequate methodology to the synthesis of key intermediates with a propargyl ketone skeleton (Fig. 1) [2].

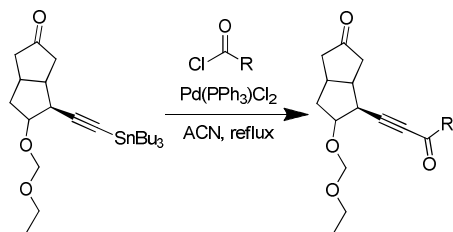


Fig. 1. General reaction scheme for alfaprostol key intermediate.

A series of 6 propargyl ketone was synthesized, isolated and fully characterized [3]. Alfaprostol key intermediate was successfully prepared. The results of this study will be presented in this contribution.

The authors wish to acknowledge to the SG-project of the Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice as well as to Cayman Pharma Neratovice.

- [1] Saibal Das, Srivari Chandrasekhar, Jhillu Singh Yadav, and René Grée: *Chem. Rev.* 107, 3286 (2007).
- [2] Rachel Lerebours, Alejandra Camacho-Soto, and Christian Wolf: *J. Org. Chem.* 70, 8601 (2005).
- [3] Sara Monteiro, Aleš Imramovský, Karel Pauk, Jan Pavlík: *Tetrahedron Lett.* 58, 2228 (2017)

5Po24

MEĎOU KATALYZOVANÁ ENANTIOSELEKTÍVNA KONJUGOVANÁ ADÍCIA ALKYLBORÁNOV

Bernard Mravec¹, Kristína Plevová¹, Radovan Šebesta¹

¹Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra organickej chémie, Ilkovičova 6, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, radovan.sebesta@uniba.sk

Konjugovaná adícia organoborónových zlúčenín na α,β -nenasýtené karbonyly katalyzovaná prechodnými kovmi predstavuje veľmi užitočný nástroj tvorby C-C väzby. [1, 2] Sawamura vo svojej práci ako prvý publikoval úspešnú metódu asymetrickej konjugovanej adície katalyzovanej meďou, pričom ako zdroj nukleofilnej častice použil organoborány pripravované hydroboráciou. [3] Cieľom našej práce bolo uskutočniť one-pot hydroboráciu nekonjugovaných terminálnych alkénov s následnou konjugovanou adíciou na α,β -nenasýtené karbonyly (**Schéma 1**).

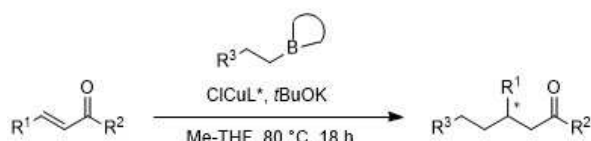


Schéma 1.

Pri optimalizácii reakcie sme sa zamerali najmä na použitie najvhodnejšieho typu bázy, ligandu, ako aj optimalizáciu teploty reakčnej zmesi a dĺžky reakčného času.

Táto práca bola finančne podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja (APVV-0321-12).

- [1] C. Hawner, A. Alexakis, *Chem. Commun.* 2010, 46, 7295.
- [2] S. R. Harutyunyan, T. den Hartog, K. Geurts, A. J. Minnaard, B. L. Feringa, *Chem. Rev.* 2008, 108, 2824.
- [3] M. Yoshida, H. Ohmiya, M. Sawamura, *J. Am. Chem. Soc.* 2012, 134, 11896.

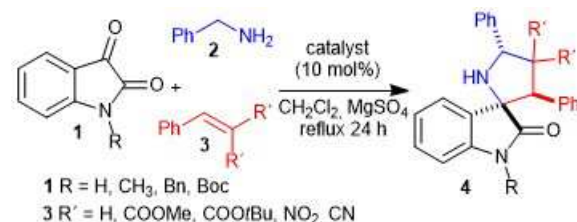
5Po25

DIASSTEREOSELEKTÍVNA CYKLOADÍCIA AZOMETÍNŮVÝCH YLIDOV

Kristína Ormandyová¹, Tibor Peňaška¹, Mária Mečiarová¹, Radovan Šebesta¹

¹Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského v Bratislave, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava 4, kristina.ormandyova@gmail.com

Organokatalytickou kaskádovou 1,3-dipolárnou cykloadíciou azometínových ylidov, ktoré vznikajú in situ z izatínu a benzylamínu, s α,β -nenasýtenými esterami sa pripravujú spirocyklické oxindoly (Obr.1). Mnohé oxindoly s viacerými stereogénnymi centrami vykazujú biologickú aktivitu, napr. antibakteriálnu, antitumorovú alebo protizápalovú.[1, 2] V študovaných cykloadíciách boli ako katalyzátory použité bifunkčné tiomočoviny, resp. skvaramidy, ktoré aktivovali substráty prostredníctvom vodíkových väzieb. Reakcie boli študované v rôznych reakčných podmienkach, napr. klasické zahrievanie, mikrovlnné žiarenie, alebo mechanická aktivácia v guľovom mlyne bez rozpúšťadla. Produkty študovaných reakcií boli získané vo forme jedného diastereoméru vo výťažkoch až do 75 %.



Obr. 1. 1,3-dipolárna cykloadícia izatínov, benzylamínu a alkénu.

Za finančnú podporu ďakujeme grantovej agentúre APVV, grant číslo APVV-15-0039.

- [1] Tian, L.; Hu, X.-Q.; Li, Y.-H.; Xu, P.-F. *Chem. Commun.* 2013, 49, 7213–7215.
- [2] Hazra, A.; Paira, P.; Sahu, K. B.; Naskar, S.;

Saha, P.; Paira, R.; Mondal, S.; Maity, A.; Luger, P.; Weber, M.; Mondal, N. B.; Banerjee, S. *Tetrahedron Lett.* 2010, 51, 1585–1588.

5Po26

SYNTEZA SUBSTITUOVANÝCH CHIRÁLNÍCH BENZTHIAZOLOVÝCH KARBAMÁTŮ JAKO POTENCIÁLNÍCH LÉČIV ALZHEIMEROVY CHOROBY

Vladimír Pejchal¹, Marcela Pejchalová², Karel Královec², Radim Havelek², Zdeňka Růžicková³

¹ Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká Republika, vladimir.pejchal@upce.cz

² Katedra biologických a biochemických věd, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká Republika.

³ Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká Republika.

Benzthiazoly jsou popsanou skupinou sloučenin s širokou oblastí biologických aktivit, a to především antibakteriálních, fungicidních, virucidních i protinádorových. Benzthiazolový kruh je také přítomný v řadě přírodních látek rozmanité biologické aktivity.

Výchozí sloučenina (*R*)-1-(6-fluorbenzthiazol-2-yl)ethanamine **2** ve formě *p*-toluensulfonové soli (PTS) byla syntetizovaná třístupňovou reakcí podle schématu 1 [1, 2]. Série nových 1-[(1*R*)-1-(6-fluor-1,3-benzthiazol-2-yl)ethyl]-3-substituovaných karbamátů byla syntetizovaná reakcí (1*R*)-1-(6-fluor-1,3-benzthiazol-2-yl)ethanaminu s vybranými substituovanými alkylchloroformiáty (Schéma 2). Připravené karbamáty byly charakterizovány ¹H, ¹³C a ¹⁹F NMR spektroskopii, HRMS, a elementární analýzou. U připraveného monokrystalu byla struktura potvrzena rentgenovou difrakční analýzou. Optická aktivita byla potvrzena měřením optické otáčivosti.

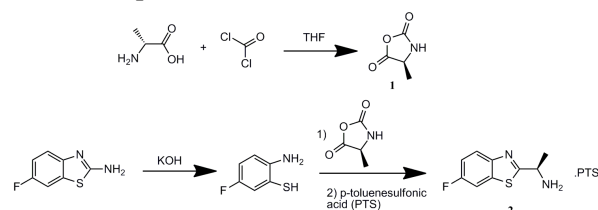


Schéma 1. Syntéza výchozí látky **2**.

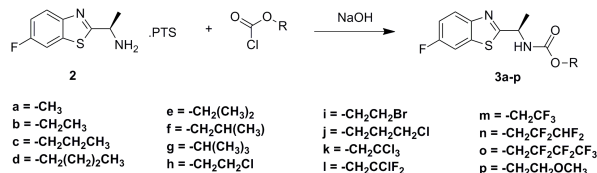


Schéma 2. Syntéza karbamátů **3a-p**.

U všech připravených karbamátů byla testována inhibiční aktivita vůči acetylcholinesteráze a butyrylcholinesteráze. Stanovené hodnoty IC₅₀ byly porovnány s hodnotami Rivastigminu, klasickým acylačním pseudo-reverzibilním karbamátovým inhibitorem cholinesteráz. U nejúčinnějších derivátů bylo dále provedeno stanovení toxicity testováním na lidské buňky s cílem stanovit potenciální škodlivé účinky testovaných sloučenin. Stanovení cytotoxicity bylo provedeno standardní metodou in vitro s použitím lidských jaterní buněčné linie HepG2 a xCELLigence RTCA DP systém byl použit pro real-time a časově závislá analýza buněčné reakce MCF7 buněk.

Závěrem lze konstatovat, že nejúčinnější deriváty vykazovaly velmi nízkou toxicitu.

[1] Hijikata Ch (2003) Process for producing substituted alkylamine derivative. US 6,608,207

[2] Pejchal, V.; Stepankova, S.; Drabina, P. *J. Heterocycl. Chem.* 2011, 48, 57

5Po27

SYNTEZA SUBSTITUOVANÝCH ANTIFUNGÁLNÍCH CHIRÁLNÍCH BENZTHIAZOLOVÝCH DIAMIDŮ

Marcela Pejchalová¹, Karel Královec¹, Radim Havelek¹, Vladimír Pejchal², Zdeňka Růžicková³

¹ Katedra biologických a biochemických věd, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká Republika, marcela.pejchaloval@upce.cz

² Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká Republika,

³ Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká Republika.

Benzthiazoly jsou popsanou skupinou sloučenin s širokou oblastí biologických aktivit, a to především antibakteriálních, fungicidních, virucidních i protinádorových. Výchozí sloučenina (*R*)-1-(6-fluorbenzthiazol-2-yl)ethanamine **2** ve formě *p*-toluensulfonové soli (PTS) byla syntetizovaná třístupňovou reakcí podle schématu 1 [1, 2]. Série nových 1-[(1*R*)-1-(6-fluor-1,3-benzthiazol-2-yl)ethyl]-3-

substituovaných diamidů **11a-q** byla syntetizovaná třístupňovou reakcí podle schématu 2. Připravené diamidy byly charakterizovány ^1H , ^{13}C and ^{19}F NMR spektroskopii, HRMS, a elementární analýzou. U připraveného monokrystalu byla struktura potvrzena rentgenovou difrakční analýzou.

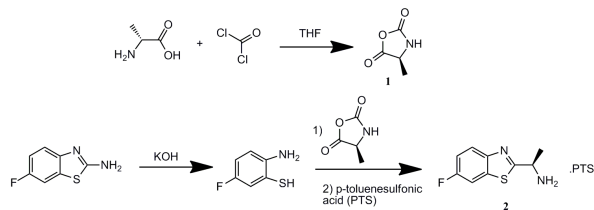


Schéma 1. Syntéza východní látky 2.

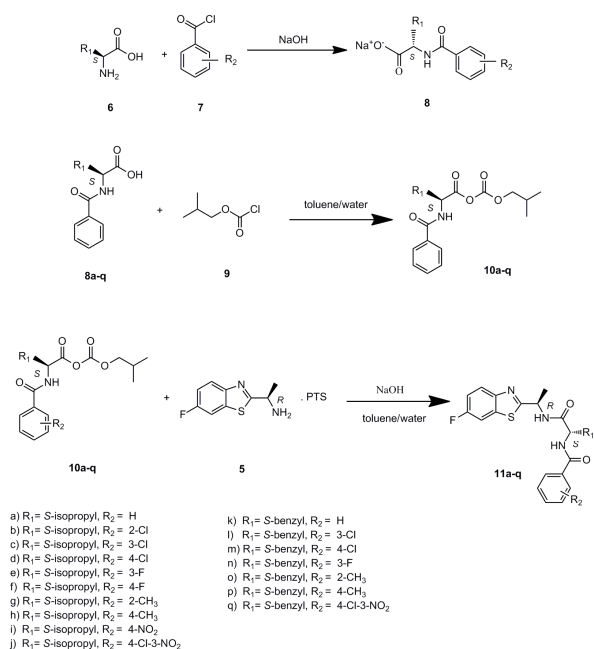


Schéma 2. Syntéza karbamátů 3a-p.

U všech připravených diamidů byla testována antifungální aktivita vůči kvasinkám rodu *Candida*. Stanovení MIC bylo provedeno agarovou diluční metodou s využitím dvojkového ředění testované látky v Sabourandově agaru. Dosažené hodnoty MIC byly porovnány s hodnotami MIC pro antibiotikum amphotericin B, který byl testován souběžně.

U nejučinnějších derivátů bylo dále provedeno stanovení toxicity testováním na lidské buňky s cílem stanovit potenciální škodlivé účinky testovaných sloučenin. Stanovení cytotoxicity bylo provedeno standardní metodou in vitro s použitím lidských jaterní buněčné linie HepG2 a xCELLigence RTCA DP systém byl použit pro real-time a časově závislá analýza buněčné reakce MCF7 buněk.

Závěrem lze konstatovat, že vybrané deriváty vykazovaly kromě velmi dobrých antifungálních účinků i velmi nízké hodnoty cytotoxicity.

[1] Hijikata Ch (2003) Process for producing substituted alkylamine derivative. US 6,608,207

[2] Pejchal, V.; Stepankova, S.; Drabina, P. (2011) *J. Heterocycl. Chem.*, 48, 57

5Po28

ENANTIOSELEKTÍVNÁ SYNTÉZA POKROČILÉHO INTERMEDIÁTU AETHERAMIDU A

Tibor Peňaška¹, Martin Kotora²

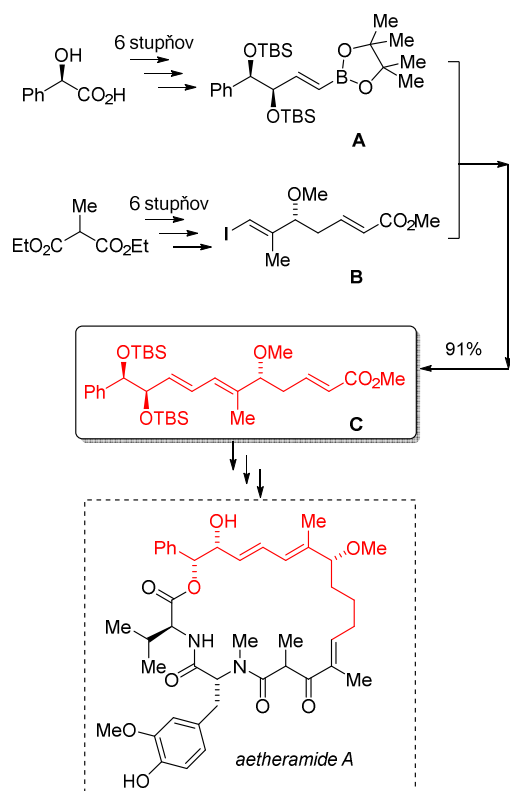
¹Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra organickej chémie, Ilkovičova 6, 84215 Bratislava, Slovenská republika;

tiborpenaska@gmail.com

²Univerzita Karlova, Prírodovedecká fakulta, Katedra organickej chémie, Hlavova 8, 128 43 Praha, Česká republika

Aetheramidy A a B sú cyklické peptidy izolované z nového myxobakteriálneho druhu *Aethrobacter*, ktoré vykazujú schopnosť inhibovať HIV-1 infekciu a sú aj cytostaticky aktívne voči karcinómu hrubého čreva. Prvú totálnu syntézu *aetheramidu A* pozostávajúcu z 18 reakčných krokov publikovali v roku 2016 Kalesse a kol. [1]. V tom istom roku He a kol. [2] pripravili spomínanú cieľovú zlúčeninu inou 15-stupňovou syntézou.

Naším cieľom bolo pripraviť kľúčový chirálny prekursor *aetheramidu A* s tromi stereogénnymi centrami (obr. 1). Z komerčne dostupnej enantioselektívna alylácia medzi produktu, ktorá prebiehala vo vysokom výťažku (87 %) a s vysokou optickou čistotou (97 % ee). Celkový výťažok jódesteru **B** bol 40 %. V prípade esteru borónovej kyseliny boli pripravené oba izoméry (*syn* aj *anti*), ktoré boli použité v syntéze. Finálnym krokom syntézy kľúčového prekursoru **C** bol Suzukiho kapling prebiehajúci s 91 % výťažkom.



Obr. 1. Syntéza chirálneho prekursoru C.

Tento projekt vznikol vďaka finančnej podpore Národného štipendijného programu (sprostredkované agentúrou SAIA, n.o.) a Grantovej agentúry Českej republiky (č. grantu 17-07707S).

- [1] Gerstmann, L.; Kalesse, M. *Chem. Eur. J.* **2016**, *22*, 11210–11212.
 [2] Qi, N.; Wang, Z.; Allu, S.R.; Liu, Q.; Guo, J.; He, Y. *J. Org. Chem.* **2016**, *81*, 12466–12471.

5Po29

MEĎOU KATALYZOVANÁ ENANTIOSELEKTÍVNA KONJUGOVANÁ ADÍCIA ALKYLBORÁNOV

Bernard Mravec¹, Kristína Plevová¹, Radovan Šebesta¹

¹Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra organickej chémie, Ilkovičova 6, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, radovan.sebesta@uniba.sk

Konjugovaná adícia organoborónových zlúčenín na α,β -nenasýtené karbonyly katalyzovaná prechodnými kovmi predstavuje veľmi užitočný nástroj tvorby C-C väzby. [1, 2] Sawamura vo svojej práci ako prvý publikoval úspešnú metódu asymetrickej konjugovanej adície katalyzovanej meďou, pričom ako zdroj nukleofilnej častice použil organoborány pripravované hydroboráciou. [3] Cieľom našej práce bolo uskutočniť one-pot hydroboráciu nekonjugovaných terminálnych alkénov

s následnou konjugovanou adíciou na α,β -nenasýtené karbonyly (**Schéma 1**).

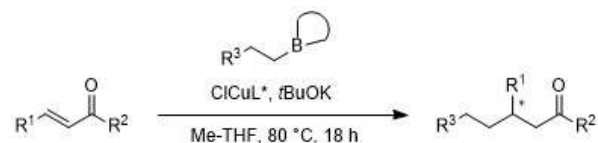


Schéma 1.

Pri optimalizácii reakcie sme sa zamerali najmä na použitie najvhodnejšieho typu bázy, ligandu, ako aj optimalizáciu teploty reakčnej zmesi a dĺžky reakčného času.

Táto práca bola finančne podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja (APVV-0321-12).

- [1] C. Hawner, A. Alexakis, *Chem. Commun.* **2010**, *46*, 7295.
 [2] S. R. Harutyunyan, T. den Hartog, K. Geurts, A. J. Minnaard, B. L. Feringa, *Chem. Rev.* **2008**, *108*, 2824.
 [3] M. Yoshida, H. Ohmiya, M. Sawamura, *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 11896.

5Po30

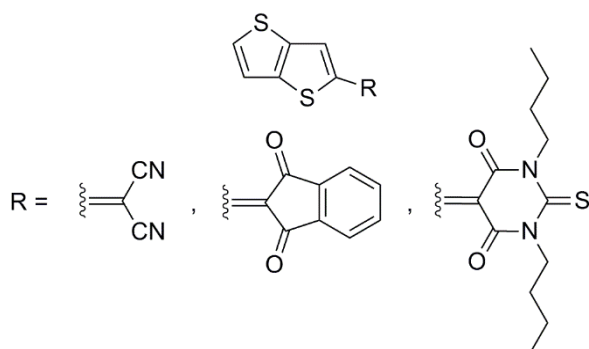
PUSH-PULL CHROMOFORY S MOTIVEM THIENO[3,2-b]THIOFENU

Jan Podlesný, Filip Bureš

Ústav organickej chémie a technológie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, Pardubice, 532 10, jan.podlesny@student.upce.cz

Látky obsahující ve své struktuře motiv thieno[3,2-b]thiofenu (TT) jsou využívány v široké škále oblastí. Jedná se zejména o světlo emitující diody, nelineární optiku [1], organické polemy řízené tranzistory [2], organické fototranzistory nebo organické solární články. V rámci těchto aplikací se thieno[3,2-b]thiofen uplatňuje především jako organický děrový polovodič. Tato kondenzovaná molekula představuje planární elektronově bohatý bicyklus, který může být využit jako elektron donorní substituent pro další strukturní modifikace. Efektivní syntéza základního TT jádra sestává ze čtyř kroků. [3] Výchozí sloučeninou je 3-bromthiofen, který je v úvodním kroku syntézy formylován v poloze 2 pomocí lithium di-*iso*-propylamidu a *N*-formylpiperidinu. Tvorba druhého přikondenzovaného heterocyklu je realizována methyl-sulfanylacetátem v přítomnosti uhličitany draselného. Vzniklý methyl-TT-2-karboxylát je hydrolyzován hydroxidem lithným na příslušnou karboxylovou kyselinu a poté dekarboxylován v *N*-methylpyrrolidonu za katalýzy oxidem

měďným. Cílové push-pull chromofory byly následně připraveny dvojkrokovou strukturní modifikací. Klíčový prekurzor pro finální Knoevenagelovu kondenzaci je thieno[3,2-*b*]thiofen-2-karboxaldehyd, který lze připravit Vilsmeierovou-Haackovou reakcí. Ten podléhá hladké reakci s akceptory jako je např. malondinitril, indan-1,3-dion nebo *N,N*-dibutylthiobarbiturová kyselina (Obr. 1). Vztahy mezi strukturou a vlastnostmi byly studovány pomocí UV-VIS absorpční spektroskopie, diferenční skenovací kalorimetrie a elektrochemie.



Obr. 1. Struktura cílových thieno[3,2-*b*]thiofenových push-pull chromoforů.

- [1] V. P. Rao, K. Y. Wong, A. K.-Y. Jen, K. J. Drost: *Chem. Mater.*, (1994), 6, 2210-2212
 [2] I. Meager, R. S. Ashraf, S. Rossbauer, H. Bronstein, J. E. Donaghey, J. Marshall, B. C. Schroeder, M. Heeney, T. D. Anthopoulos, I. McCulloch: *Macromolecules*, (2013), 46, 5961-5967
 [3] L. S. Fuller, B. Iddon, K. A. Smith: *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 1*, (1997), 3465-3470

5Po31

SYNTÉZA A CHARAKTERIZÁCIA NOVÝCH BTBT DERIVÁTOV S ALKYLTHIOFÉNOVÝM JADROM

Róbert Šandrik¹, Pavol Tisovský¹, Anton Gáplovský¹, Martin Weis²

¹ Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Chemický ústav, Ilkovičova 6, 84215 Bratislava,

² Ústav elektroniky a fotoniky, Slovenská Technická Univerzita, Ilkovičova 3, 81219 Bratislava, robo.sandrik@gmail.com

Syntéze a charakterizácii organických polovodičov sa za posledné dve dekády venovala značná pozornosť. Široký aplikačný potenciál ako napríklad organické tranzistory s efektom poľa (OFETs), organické svetlo-emitujúce diódy (OLEDs), a organická foto-voltaika (OPVs) podporoval intenzívny výskum v tejto oblasti. Z materiálového hľadiska najviac študované

molekuly predstavujú polyacény, polytiofény deriváty karbazolu etc. Dôležitú skupinu zlúčenín študovaných pre konštrukciu OFET tvoria deriváty benzo[*b*]benzo[4,5]tieno[2,3-*d*]tiofénu (BTBT). Prvý úspešne použitý materiál pre OFET bol 2,7-difenyl-BTBT; naparovaním pripravený tranzistor vykazoval mobility až do 2,0 cm² V⁻¹ s⁻¹ pri laboratórnej teplote. Odtedy bolo pripravených a testovaných viacero BTBT derivátov a π -rozšírených BTBT analógov ako polovodičov pre konštrukciu OFET zariadení.[1, 2]

Navrhli sme a nasyntetizovali nové BTBT deriváty s tiofénovým jadrom obsahujúcim solubilizujúce alkylové skupiny na použitie pre OFET zariadenia. Tieto nové deriváty boli pripravené z 2,7-dijód-BTBT s využitím Negishiho couplingovej reakcie s výtťažkami do 73%. Prvotné neoptimalizované merania ukázali sľubnú hodnotu mobility 0,12 cm² V⁻¹ s⁻¹. Pričom organický materiál bol nanášaný z roztoku.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APVV-14-0740.

[1] K. Takimiya, I. Osaka, T. Mori et al., *Acc. Chem. Res.*, 47, 1493-1502 (2014).

[2] K. Takimiya, H. Ebata, K. Sakamoto et al., *J. Am. Chem. Soc.*, 128, 12604-12605 (2006).

5Po32

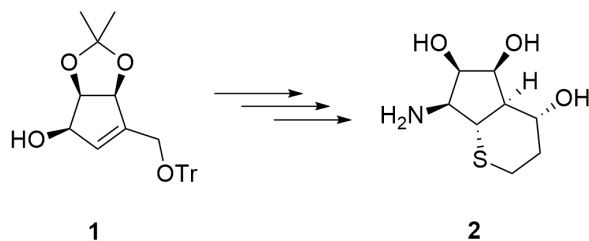
SYNTÉZA POTENCIÁLNEHO INHIBÍTORA α -MANOZIDÁZY II NAVRHNUTÉHO POMOCOU MOLEKULOVÉHO MODELOVANIA

Mária Spišáková, Maroš Bella, Miroslav Kooš¹

¹ Centrum Glykomiky, Chemický ústav Slovenskej akadémie vied, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, maria.spisakova@savba.sk

α -Manozidáza II(GM-II) patrí do rodiny enzýmov, ktorá je súčasťou biosyntetického procesu tvorby komplexných a hybridných *N*-glykánov. *N*-Glykány sú glykoproteíny v ktorých oligosacharidová časť je kovalentne naviazaná na zvyšok asparagínu cez *N*-glykozidickú väzbu. Plnia významnú funkciu pri raste bunky, rozpoznaní antigénov, foldingu proteínov, aktivácii receptorov a mnohých iných [1]. Na druhej strane, nedávne štúdie potvrdili, že v porovnaní so zdravými bunkami nádorové bunky produkujú *N*-glykány vo väčšej miere a využívajú ich pre svoje funkcie [2]. Z toho dôvodu má inhibícia α -manozidázy II veľký terapeutický potenciál pri potlačení progresu rakoviny. Na základe štruktúry dvoch známych alkaloidov (-)

Swainsonínu a Manostatínu A [3], ktoré inhibujú GM-II, bola pomocou počítačových metód navrhnutá štruktúra nového potenciálneho inhibítora α -manoizidázy **2** (obr.1).



Obr. 1. Štruktúra potenciálneho inhibítora α -manoizidázy **2**.

Tento príspevok popisuje prípravu polyhydroxycyklopenténu **1** ako kľúčového intermediátu a jeho ďalšie reakcie pre prípravu navrhovaného inhibítora **2**. Kľúčový polyhydroxycyklopentén **1** bol pripravený v ôsmich syntetických krokoch vychádzajúc z D-lyxózy.

Táto práca vznikla vďaka finančnej podpore Agentúry pre podporu vedy a výskumu APVV (grant č. APVV-0484-12) a grantovej agentúre VEGA (grant č. 2/0064/15 a 2/0024/16). Tento príspevok je výsledkom realizácie projektu Centra Excelentnosti pre Glykomiku ITMS 26240120031, podporovaného Operačným programom pre výskum a vývoj, ktorý je financovaný z ERDF.

- [1] Stanley, P.; Schachter, H.; Taniguchi, N. in *Essentials of Glycobiology*, 2nd ed. (Eds.:A.; Varki, R. D.; Cummings, J. D.; Esko, H. H.; Freeze, P.; Stanley, C. R.; Bertozzi, G. W.; Hart, M. E. Etzler), Cold Spring Harbor, New York, 2009.
- [2] Vasconcelos-dos-Santos, A.; Oliveira, I. A.; Lucena, M. C.; Mantuano, N. R.; Whelan, S. A.; Dias, W. B.; Todeschini, A. R. *Front. Oncol.* 2015, 5, 1.
- [3] a) Pyne, S. G. *Curr. Org. Synth.* 2005, 2, 39; b) Vasella, A.; Hu, G. *Helv. Chim. Acta* 2004, 87, 2405.

5Po33

JODOVANÁ RADIOZNAČITELNÁ ANALOGA CHOLINU PRO DIAGNOSTIKU A TERAPII

Pavel Švec¹, Jan Kučka¹, Ondřej Sedláček¹, Martin Hrubý¹, Zbyněk Nový², Miloš Petřík², Marián Hajdúch²

¹Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 1888/2, 162 06 Praha, prion2@seznam.cz

²Ústav molekulární a translační medicíny Lékařské fakulty Univerzity Palackého v Olomouci, Hněvotínská 1333/5, 779 00 Olomouc

Proteiny transportující cholin (CTL) jsou jednou z molekulárních struktur vhodných pro cílení diagnostických a terapeutických radiofarmak, jelikož jsou ve zvýšené míře přítomny na povrchu některých typů nádorových buněk, především u karcinomu prostaty, malobuněčného karcinomu plic a gliomu [1]. Tohoto faktu se již využívá v klinické praxi, kde jsou pro vizualizaci některých typů nádorových ložisek, zejména karcinomu prostaty, využívány tři radioizotopově značené deriváty cholinu, a to [¹⁸F]fluormethylcholin, [¹⁸F]fluorethylcholin a [¹¹C]cholin [2]. Zmíněné deriváty cholinu používané v klinické praxi však trpí řadou nedostatků pramenících zejména z krátkého poločasu rozpadu ¹¹C ($t_{1/2}$ = 20 min) a ¹⁸F ($t_{1/2}$ = 110 min) [3]. V této práci bylo syntetizováno a testováno 50 nových aromatických analog cholinu radioznačitelných pomocí různých izotopů jodu, z nichž některé vykazují vyšší vazebné konstanty než fluormethylcholin či přirozený ligand cholin. Jodovaná analoga cholinu překonávají některé nedostatky výše zmíněných používaných radiofarmak, jelikož existují tři medicínsky relevantní radioizotopy jodu s výrazně delšími poločasy rozpadu. Vhodným zvolením izotopu jodu lze navíc získat radiofarmakum aplikovatelné nejen pro pozitronovou emisní tomografii (¹²⁴I), ale také pro jednofotonovou výpočetní emisní tomografii a planární scintigrafii (¹²³I, ¹³¹I) a v neposlední řadě také pro terapii (¹³¹I).

Autoři děkují za finanční podporu Ministerstvu zdravotnictví České republiky (grant č. 16-30544A) a Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (granty č. LM2015064 ERIC a 7F14009).

- [1] Hara, T.; et al. *Mol. Imaging* 2006, 5 (4), 498–509.
- [2] Umbehre, M. H.; et al. *Eur. Urol.* 2013, 64 (1), 106–117.
- [3] Bauman G.; et al. *Prostate Cancer Prostatic Dis.* 2012, 15 (1), 45–55.

5Po34

KAPILÁRNÍ MONOLITICKÁ KOLONA
PRO ASYMETRICKOU HENRYHO
REAKCIGabriela Nováková¹, Jan Svoboda¹, Pavel Drabina¹,
Miloš Sedlák¹¹Ústav organické chemie a technologie, Fakulta
chemicko-technologická, Univerzita Pardubice,
Studentská 573 532 10 Pardubice,
jan.svoboda@upce.cz

Zachování současného životního standardu lidské populace a jeho další rozvoj není nadále možný bez vývoje ekologických dlouhodobě fungujících chemických procesů a technologií. Jednou z možností jak přispět k odpovědnému zacházení se surovinami je používání recyklovatelných katalyzátorů. Takovéto katalyzátory lze získat imobilizací známých homogenních katalyzátorů na pevný nosič. Výhodou těchto katalyzátorů je jejich snadná separace a znovupoužití. Navíc je možné takovéto katalyzátory využít v průtokových mikroreaktorech, čímž odpadá nutnost separace a recyklace katalyzátorů.

V rámci této práce jsme optimalizovali přípravu kapilární monolitické kolony – mikroreaktoru pro asymetrickou Henryho reakci. Katalyzátor byl ukotven na monolit z polystyrenu síťovaného divinylbenzenem. K přípravě imobilizovaného katalyzátoru bylo využito dvou postupů: a) post-syntetické modifikace monolitu obsahujícího chlormethylové funkční skupiny zvoleným katalyzátorem, b) kopolymerizace, přičemž zvolený katalyzátor byl předem navázan na monomerní styren. Jako vlastního katalyzátoru bylo použito komplexu octanu měďnatého s (2*S*,5*S*)-5-isopropyl-2,5-dimethyl-2-(pyridin-2-yl)midazolidin-4-thionem [1].

Monolit byl připravován radikálovou termicky iniciovanou polymerizační reakcí směsi obsahující monomery (funkcionalizovaný monomer, styren a divinylbenzen), dále porogeny (dodecylalkohol a methanol) a jako iniciátor byl použit azobisisobutyronitril. Tato směs byla polymerována 24 h při 80 °C. Postmodifikace v případě použití 4-vinylbenzylchloridu probíhala proplachováním kolony roztokem chirálního ligandu v dimethylsulfoxidu za přítomnosti báze (DBU). Komplex byl připraven následným promýváním kolony methanolickým roztokem octanu měďnatého.

Autoři děkují Grantové agentuře České republiky za finanční podporu (projekt číslo 17-08499S).

[1] Gabriela Nováková, Pavel Drabina, Božena Frumarová, Miloš Sedlák: Adv. Synth. Catal. (2016).

5Po35

SYNTÉZA BOROVÝCH HETEROCYKLŮ
REAKCÍ DIAZONIOVÝCH SOLÍ S β -
ENAMINOAMIDYMarkéta Svobodová¹, Luboš Socha¹¹Ústav organické chemie a technologie, Fakulta
chemicko-technologická, Univerzita Pardubice,
Studentská 573, 532 10 Pardubice
marketa.svobodova@upce.cz

β -Enaminoamidy mající fenylyskupinu na amidickém dusíku reagují s 4-methylbenzendiazonium-tetrafenylborátem za vzniku šestičlenného heterocyklického systému s uspořádáním –N–B–N–, –N–B–O– nebo –N–B–N–N–, a to v závislosti na reakčních podmínkách a na struktuře výchozího enaminoamidu [1].

β -Enaminoamidy **1** s nesubstituovanou nebo methyl substituovanou amidickou skupinou poskytují s diazoniovou solí nový typ borového heterocyklu (Schéma) [2]. Úpravou reakčních podmínek lze získat jako minoritní produkty také příslušné oxazaboriny a diazaborinony – sloučeniny, které vznikaly v předchozí práci [1]. Látky byly charakterizovány ¹H, ¹³C, ¹⁵N a ¹¹B NMR spektroskopii a v některých případech také rentgenostrukturní analýzou.

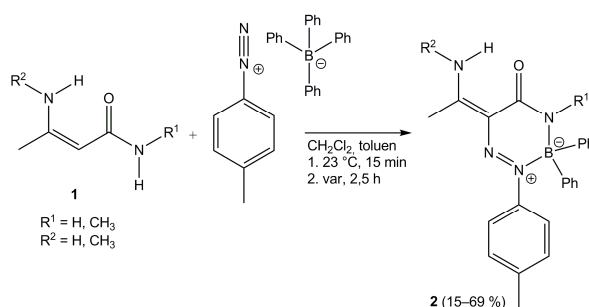


Schéma. Reakční schéma syntézy triazaborinonů **2**.

[1] Markéta Svobodová, Jan Bárta, Petr Šimůnek, Valerio Bertolasi, Vladimír Macháček: J. Organomet. Chem (2009)

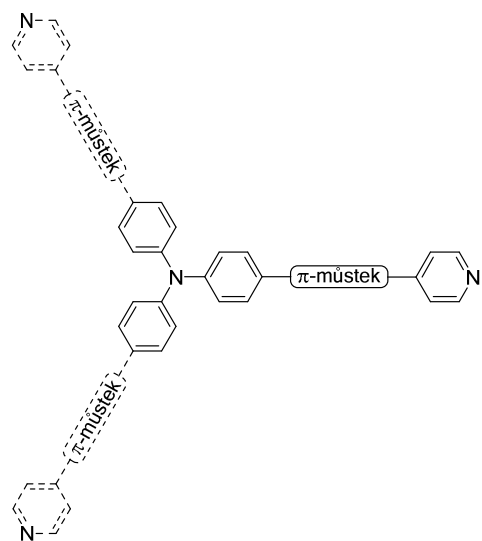
[2] Luboš Socha. Příprava heterocyklických sloučenin s atomem boru reakcí enaminoamidů s 4-substituovanými benzendiazonium-tetrafenylboráty. Pardubice, 2011. Diplomová práce. Univerzita Pardubice. FChT. ÚOChT.

5Po36

S TRIFENYLAMINY K BÍLÝM SVĚTLO
EMITUJÍCÍM DIODÁMJiří Tydlitát¹, Sylvain Achelle²¹Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, Pardubice 53210, Česká republika. jiri.tydlitat@upce.cz²Institut des Sciences Chimiques de Rennes UMR CNRS 6226, IUT de Lannion, rue Edouard Branly, BP 30219, F22302 Lannion Cedex, France.

Elektroluminiscence organických látek byla poprvé pozorována počátkem padesátých let a to u derivátů akridinu a karbazolu. Nové odvětví organické elektroniky se nicméně začalo rozvíjet až od roku 1987, kdy Tang a VanSlyke vyvinuli první organickou světlo emitující diodu (OLED). Jako luminiscentní film byl v této diodě použit fluorescentní hlinitý komplex 8-hydroxychinolinu (Alq₃) a tato dioda vydávala zelené světlo.[1] První organickou diodu emitující bílé světlo (WOLED) popsal Kido a spol. v roce 1994.[2] V posledních deseti letech pak lze pozorovat narůstající počet prací zabývajících se WOLEDy.

Zájem o organické materiály vychází především z jejich výhod, které mají oproti anorganickým systémům. Je to především nižší cena, nižší toxicita, snadnější úprava vlastností obměnou struktury molekuly a jednodušší způsob výroby diody. V této práci byly jako luminofory využity deriváty trifenylaminu nesoucí jednu, dvě či tři terminální pyridinové jednotky na různých typech π -konjugovaných můstků (Obr. 1). U připravených roztoků těchto derivátů a jejich pyridiniových solí v různých poměrech bylo dosaženo fotoluminiscence v barvách od modré přes bílou až po žluto-oranžovou.



Obr. 1. Lineární, kvadrupolární a tripodální trifenylaminy.

Fotoluminiscence systému pyridin/pyridinium byla dále ověřena v pevné fázi u připravených polystyrenových tentých filmů. Předmětem dalšího výzkumu je pak elektroluminiscence těchto látek.

[1] C. W. Tang, S. A. VanSlyke *Appl. Phys. Lett.* 1987, 51, 913-915.

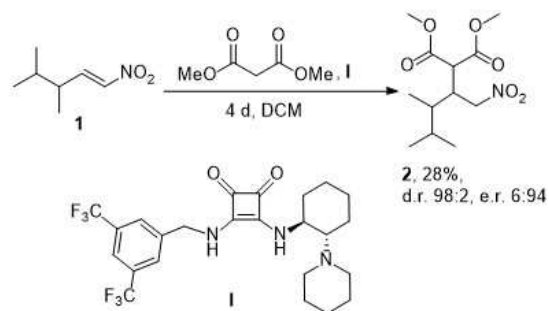
[2] J. Kido, K. Hongawa, K. Okuyama, K. Nagai *Appl. Phys. Lett.*, 1994, 64, 815-817.

5Po37

KINETICKÉ ROZLIŠENIE MICHAELOVEJ
ADÍCIE V SYNTÉZE 4-
METYLPREGABALÍNUDenisa Vargová¹, Rastislav Baran¹, Radovan Šebesta¹¹Katedra organickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava 4

denisa.vargova447@gmail.com

Pri stereoselektívnej syntéze 4-metylpregabalínu sme sa rozhodli uplatniť katalýzu vodíkovými väzbami, ktorá sa nám osvedčila pri predchádzajúcej práci. [1] Práca je zameraná na štúdium vplyvu štruktúry katalyzátora na jeho schopnosť kinetického rozlíšenia v Michaelovej adícii.



Obr. 1. Michaelova adícia dimethylmalonátu na nitroalkén **1**, s použitím katalyzátora **I**. Reaktanty sa rozpustili v CH₂Cl₂, a nechali sa miešať pri laboratórnej teplote 4 dni.

Použili sme rôzne skvaramidové katalyzátory s chinínovou, resp. chinidínovou, a cyklohexándiamínovou chirálnou časťou. Pozorovali sme, že s použitím týchto katalyzátorov možno z racemického nitroalkénu **1** získať enantioméne obohatený adukt **2**- a to až s d.r. 98:2, a e.r. 6:94. Zámenou chirálnej informácie katalyzátora sme dokázali získať opačné enantioméry produktov. Zaujímalo nás, či by bolo možné získať všetky možné diastereoizoméry takouto obmenou. Vyskúšali sme dva nové katalyzátory s binolovými

zvyškami. Vyšší výťažok reakcie bol dosiahnutý po skrínungu rozpúšťadiel.

Optimalizovaná bola Michaelova adícia dimetylmalonátu na nitroalkén **1**, za vzniku aduktu **2**, ktorý bol v dvoch syntetických krokoch transformovaný na 4-metylpregabalín, ktorý je zaujímavým derivátom pre farmaceutický priemysel. [2]

[1] Baran, R.; Veverková, E.; Škvorcová, A.; Šebesta, R. *Org. Biomol. Chem.* **2013**, *11*, 7705–7711.

3. Belliotti, T. R.; Capiris, T.; Ekhat, I. V.; Kinsora, J. J.; Field, M. J.; Heffner, T. G.; Meltzer, L. T.; Schwarz, J. B.; Taylor, Ch. P.; Thorpe, A. J.; Vartanian, M. G.; Wise, L. D.; Zhi-Su, T.; Weber, M. L.; Wustrow, D. J. *J. Med. Chem.* **2005**, *48*, 2294–2307.

5Po38

SCHIFFOVY BÁZE ODVOZENÉ OD SULFADIAZINU – SYNTÉZA A ANTIBAKTERIÁLNI AKTIVITA

Martin Krátký¹, Jiřina Stolaříková², Klára Konečná¹, Jarmila Vinšová¹

¹Univerzita Karlova, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Akademia Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové
vinsova@faf.cuni.cz

²Zdravotní ústav se sídlem v Ostravě, Partyzánské náměstí 7, 702 00 Ostrava

Schiffovy báze patří k často studovaným derivátům a chemickým obměnám v medicíně. Azomethinová skupina je farmakoforem využívaným pro lepší distribuci a biodostupnost v celé řadě farmakologických skupin. Vykazují slibné antibakteriální, antifungální, antiparasitické, antivirové a další vlastnosti [1], snadno tvoří ligandy kovových komplexů. Schiffovy báze odvozené od substituovaných sulfonamidů, vykázaly aktivitu vůči *Mycobacterium tuberculosis* (*Mtb.*), ale i netuberkulózním kmenům [2]. Naše dřívější výsledky salicylaldehydových Schiffových bází [3] nás inspirovaly k jejich systematickému studiu.

Reakcí sulfadiazolu a odpovídajících aldehydů (substituované salicylaldehydy a 5-nitrofurán-2-karbaldehyd) bylo připraveno sedmkrát 4-[(2-hydroxybenzyliden)amino]-N-(pyrimidin-2-yl)benzenesulfonamidů, které byly charakterizovány a hodnoceny na gram-positivní a gram-negativní bakterie, houby, *Mtb.* a netuberkulózní mykobakteria (*M. kansasii*, *M. avium*).

Mezi bakteriemi vykazoval rod *Staphylococcus*, včetně methicillin rezistentního kmene (MRSA), nejvyšší citlivost s hodnotami inhibičních koncentrací od 7,81 μM . Růst *Candida* sp. a *Trichophyton mentagrophytes* byl inhibován v koncentracích od 1,95 μM . Jako nejselektivnější Schiffova báze pro tyto kmeny byl identifikován 4-[(2,5-dihydroxybenzyliden)amino]-N-(pyrimidin-2-yl)benzenesulfonamid s širokospektrální aktivitou a s indexem selektivity vyšším než 16. Nesubstituovaný 4-[(2-hydroxybenzyliden)amino]-N-(pyrimidin-2-yl)benzen-sulfonamid je vhodný pro inhibici tuberkulózních a atypických mykobakterií. Obecně polyhalogenace salicylové části molekuly zlepšila antibakteriální a antifungální aktivitu, ale také cytotoxicitu. Některé deriváty nabízejí více výhodných vlastností než samotný sulfadiazin, což představuje slibný start pro další optimalizaci struktury a vývoj potenciálních antimikrobiálních látek.

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 17-27514Y.

[1] C.M. Silva, D.L. Silva et al.: *J. Adv. Res.* **2** (2011) 1–8.

[2] S.M. Ameen, M. Drancourt: *Antimicrob. Agents Chemother.* **57** (2013) 6370–6371.

[3] M. Krátký, J. Vinšová, et al.: *Eur. J. Med. Chem.* **50** (2012) 433–440.

5Po39

PREPARATION AND REACTIVITY OF 5-BROMISOXAZOLIDINE

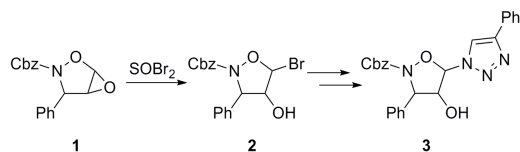
Ondrej Záborský¹, Ján Moncol¹, Jana Doháňošová¹

¹Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava, Slovak Republic, ondrisko712@gmail.com

Recently, we synthesized stable isoxazolidinyl epoxides, which were successfully used in the preparation of the various 5-substituted 4-hydroxyisoxazolidines [1]. On the other hand, these epoxides reacted with some nucleophiles very slowly or they did not react at all and therefore we decided to prepare more reactive isoxazolidines.

We prepared model 5-bromoisoxazolidine **2** from the epoxide **1** in the reaction with thionyl bromide. We monitored this transformation by the NMR spectroscopy to clarify the course of the reaction. Isoxazolidine **2** was then used in the reactions with the various nucleophiles to study its reactivity. Finally, the synthetic potential of 5-bromoisoxazolidine **2** was demonstrated with the preparation of triazol **3** since these types of

isoxazolidines showed potential antitumor and antiviral activity [2]. Preparation, reactivity and the results of the NMR experiments of 5-bromoisoxazolidine will be discussed.



The authors gratefully thank the Slovak Grant Agencies (APVV, project No. APVV-14-0147; VEGA,

project No. 1/0488/14 and ASFEU, Bratislava, ITMS project No. 26240120001, 26240120025).

- [1] Ondrej Záborský, Tomáš Malatinský, Jaromír Marek, Ján Moncol, Róbert Fischer: Eur. J. Org. Chem., 3993 (2016).
- [2] Roberto Romeo, Salvatore V. Giofrè, Caterina Carnovale, Agata Campisi, Rosalba Parenti, Lorenzo Bandini, Maria A. Chiacchio: Bioorg. Med. Chem. 21, 7929 (2013).

POSTERY - SEKCIA 6 POLYMÉRY

6Po01

VLIV DERIVÁTŮ FERROCENU NA ZASÝCHÁNÍ ALKYDOVÝCH NÁTĚROVÝCH HMOT

Jan Honzíček¹, Jaromír Vinklárěk², Petr Kalenda¹

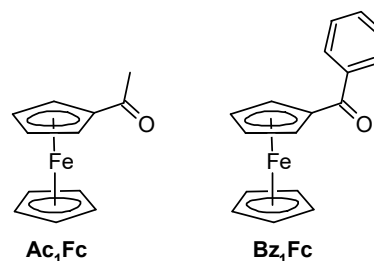
¹Ústav chemie a technologie makromolekulárních látek, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, jan.honzicek@upce.cz

²Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice

Alkydové pryskyřice modifikované rostlinnými oleji patří mezi jedny z nejrozšířenějších pojiv na dnešním trhu nátěrových hmot. Hlavními výhodami těchto pojiv jsou jejich relativně nízká pořizovací cena a vysoký podíl obnovitelných přírodních zdrojů. Zasychání alkydových pojiv, při kterém tekutý nátěr přechází na pevný film, probíhá radikálovým mechanismem vlivem vzdušného kyslíku. Tento proces (tzv. autooxidace) probíhá za běžných podmínek velmi pomalu a proto se v praxi urychluje přidávkou aditiv (tzv. sikativů). Mezi komerčně nejúspěšnější sikativy patří kobaltnaté soli karboxylových kyselin, které jsou dobře rozpustné v organických rozpouštědlech. Hlavním omezením při aplikaci těchto sikativů je jejich toxicita [1, 2], což vede výrobce nátěrových hmot k hledání nových vysoce účinných sikativů, které by měli kobaltnaté sikativy zcela nahradit. V současné době je

výzkum zaměřen především na sloučeniny manganu, železa a vanadu [3].

V této práci je porovnávána sikativační aktivita acetylferrocenu a benzoylferrocenu (Obr. 1) v rozpouštědlové alkydové pryskyřici modifikované sojovým olejem. Oba tyto komplexy vykazují optimální sikativační vlastnosti při koncentracích srovnatelných s komerčním kobaltnatým sikativem (0,06–0,1 hm% kovu v sušině). Kinetika zasychání alkydové pryskyřice byla studována pomocí infračervené spektroskopie. Metodou ATR byl pozorován vliv difuze kyslíku na prosychání nátěrových filmů.



Obr. 1. Struktura studovaných sikativů.

- [1] D. Lison, M. De Boeck, V. Verougstraete, M. Kirsch-Volders, Occup. Environ. Med. 58 (2001) 619-625.
- [2] M. De Boeck, M. Kirsch-Volders, D. Lison, Mutat. Res. 533 (2003) 135-152.
- [3] M. D. Soucek, T. Khatib, J. Wu, Prog. Org. Coat. 73 (2012) 435-454.

6Po02**MONOMÉRY NA BÁZE BUTYROLAKTÓNU PRE PRÍPRAVU HYDROGÉLOV A POLYMÉRNÝCH NANOČASTÍC**

Ľudmila Hrčková¹, Jozef Kollár¹, Miroslav Mrlík²,
Sharmaine B. Luk³, Jaroslav Mosnáček¹

¹ Ústav polymérov, SAV, 845 41 Bratislava, Slovenská republika,

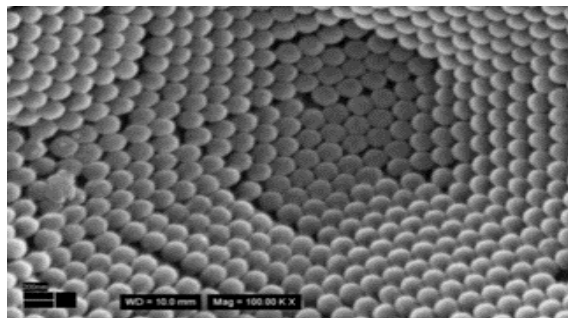
² Centre of Polymer Systems, University Institute, Tomáš Baťa University in Zlín, 760 01 Zlín, Česká republika

³ Queen's University, Department of Chemical Engineering, Kingston, Ontario, Canada
Ludmila.Hrckova@savba.sk

Prírodné polyméry boli pripravené ako perspektívny materiál s vynikajúcimi absorpčnými vlastnosťami. α -metylén- γ -butyrolaktón (MBL), monomér z obnoviteľných zdrojov môže byť izolovaný vo forme tulipozidu z tulipánov alebo z cukrovej biomasy. Podobný monomér γ -metyl- α -metylén- γ -butyrolaktón (MeMBL) môže byť pripravený z bioderivátu kyseliny levulovej.

Tento výskum je zameraný na syntézu a charakterizáciu nových superabsorpčných polymérnych materiálov, ktoré sa získali z hydrolyzovaného MBL a MeMBL. Kopolymerizácia monomérov s akrylamidom v rôznych pomeroch v prítomnosti sieťovacieho činidla poskytuje hydrogély s vynikajúcim stupňom napučania a s dobrou manipulovateľnosťou. Sledoval sa vplyv chemického zloženia, koncentrácie monomérov vo vode a množstva sieťovacieho činidla. Hydrogély vykazovali rovnovážny stupeň napučania v rozmedzí 10 000 – 80 000 %. Kapacita napučania významne narástla s rastúcou koncentráciou hydrolyzovanej formy butyrolaktónového monoméru.

MBL a MeMBL boli použité aj ako monoméry na prípravu nanočastíc prostredníctvom emulznej polymerizácie. Výsledky sú prezentované pre polymerizáciu MBL a MeMBL bez, respektíve v prítomnosti rôznych typov emulgátorov. Sledoval sa taktiež vplyv koncentrácie monoméru, emulgátora a iónovej sily na veľkosť a distribúciu nanočastíc. V závislosti od reakčných podmienok boli pripravené takmer monodisperzné polymérne častice s rozmerom od 0,15 do 0,60 μm .



Obr. 1. SEM z PMBL nanočastíc.

Podakovanie: Autori ďakujú za finančnú podporu Fondu európskeho regionálneho rozvoja prostredníctvom projektu POLYFRIEND, projekt č. HUSK 1101/1.2.1/0209, APVV grantovej agentúre prostredníctvom grantov č. APVV-14-0891, APVV-15-0296 a APVV-15-0528.

6Po03**TERMICKÉ VLASTNOSTI KYSELINY POLYMLIEČNEJ PO APLIKÁCIÍ UV ŽIARENIA**

Ivica Janigová¹, Katarína Csomorová¹, Agnesa Fiedlerová¹, Lyda Rychlá¹, Jozef Rychlý¹, Miroslav Šlouf²

¹ Ústav polymérov, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava,
Ivica.Janigova@savba.sk

² Ústav makromolekulární chemie AV ČR, Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6, Česká republika

Kyselina polymliečna (PLA) ako biodegradovateľný polymér, vďaka dobrým mechanickým vlastnostiam, patrí medzi biopolyméry s možnosťou využitia v priemysle [1]. Biodegradácia PLA prebieha redukovaním molekulovej hmotnosti do takej miery pre cytoplazmické bunky, že dochádza k mineralizácii za vzniku vody, oxidu uhličitého a zbytkovej biomasy [2]. Jeden zo spôsobov ako iniciovať redukciu molekulovej hmotnosti je pôsobenie UV žiarenia, ktoré môže vyvolať oxidáciu kyslíkom a/alebo slnečným žiarením. UV žiarenie ovplyvňuje vlastnosti týkajúce sa zvyškovej termickej a termooxidačnej stability, termických vlastností ako sú teplota sklenenia, teplota topenia, kryštalizácie a pod. UV iniciovaná degradácia sa preto môže použiť ako modelová metóda na simulovanie degradácie v prírode.

V tejto práci sme sa preto zamerali na sledovanie vplyvu UV žiarenia na PLA tromi termoanalytickými metódami – DSC, TGA a chemiluminiscenciou v inertnej atmosfére, ktoré

boli doplnené IČ spektroskopiou a elektrónovou mikroskopiou.

Výsledky ukázali najväčšie zmeny v hodnotách skelného prechodu a teploty studenej kryštalizácie, ktoré odrážajú množstvo neskryštalizovanej vzorky. Ich hodnoty sa s rastúcim časom pôsobenia UV žiarenia posúvali k vyšším hodnotám. Chemiluminiscenčné merania ožiarených vzoriek sú charakterizované píkom, ktorého intenzita rastie s rastúcim časom pôsobenia žiarenia. Píky reprezentujú rozklad hydroperoxidov tvorených počas degradácie [3]. Tieto výsledky korešponujú s postupujúcou degradáciou PLA vplyvom UV žiarenia. IČ spektroskopie potvrdila nárast množstva hydroperoxidov a peroxidov s rastúcim časom degradácie. Na mikroskopických obrázkoch je viditeľné zdrsnenie povrchu vzoriek s rastúcim časom degradácie a pri najdlhších časoch pôsobenia žiarenia sa pozorovali diery na povrchu vzoriek, ktoré ukazujú na odleptanie vplyvom žiarenia.

Autori ďakujú za finančnú podporu Vedeckej grantovej agentúry MŠVVaŠ a SAV VEGA, Grant No. 2/0122/15.

- [1] Borská K, Danko M, Mosnáček J. Photodegradation and photochemical crosslinking of polylactide. *Chem Listy*. 2014;108:1030-39.
- [2] Aoyagi Y, Yamashita K, Doi Y. Thermal degradation of poly[(R)-3-hydroxybutyrate], poly[ε-caprolactone], and poly[(S)-lactide] *Polym Degrad Stab* 2002;76:53-59.
- [3] Rychlý J, Rychlá L, Stloukal P, Koutný M, Pekařová S, Verney V. UV initiated oxidation and chemiluminiscence from aromatic-aliphatic copolyesters and polylactic acid. *Polym. Degrad. Stab.* 2013;98:2563-63.

6Po04

TRACKING OF DOUBLE-LABELED THERMORESPONSIVE POLYMER BIOLOGICAL BEHAVIOR

Lenka Loukotová², Věra Kolářová¹, Mariana Veselá¹, Jan Kučka², Martin Hrubý², Mariia Rabyk², Payla Francová¹, Petr Páral¹, Tomáš Heizer³, Luděk Šefc¹

¹Center for Advanced Preclinical Imaging (CAPI), First Faculty of Medicine, Charles University, Salmovská 3, 120 00 Prague 2, Czech Republic, Vera.Kolarova@lfl.cuni.cz

²Institute of Macromolecular Chemistry, ASCR, v. v. i., Heyrovský Sq. 2, 162 06 Prague 6, Czech Republic

³Institute of Pathological Physiology, First Faculty of Medicine, Charles University, U Nemocnice 5, 128 53 Prague 2, Czech Republic

β-Glucan is well known polysaccharide immunostimulant present, e.g., in mushroom

Auricularia auricula-judae (also known as Jew's ear). If conjugated with radiolabeled thermoresponsive polymer it possesses synergic immunoradiotherapeutic properties.

To study biological behavior of this hybrid copolymer, we used mice (strain C57BL/6) bearing EL4 tumors. We separated mice into four groups. The first group (IMUNO) was treated with β-glucan-graft-poly(2-isopropyl-2-oxazoline-co-2-butyl-2-oxazoline) bearing at the graft ends fluorescence dye Dyomics-615 and 1,4,7,10-tetraazacyclododecane-1,4,7,10-tetraacetic acid (DOTA). The second group (RADIO-IMUNO) was treated with the same polymer, here having at the graft ends complex DOTA-yttrium-90(III). The third group (RADIO) was treated only with corresponding polyoxazoline grafts bearing complex DOTA-yttrium-90(III) and the fourth group we used without treatment as a control group.

We measured for two weeks polymer depot stability *in vivo* with Optical Imaging System. We are also able to collect signal from radioactive isotopes by converting high energy beta particles into visible light.

With this highly sensitive system we are capable of detecting both labels (Dy-615, ⁹⁰Y) on β-glucan-graft-polyoxazoline simultaneously, track its fate in a live organism and control spacial effectivity directly in a tumour.

We acknowledge financial support from Ministry of Education Youth and Sport of the Czech Republic (LM2015064 ERIC, SVV 260 371 / 2017, LM2015062 Czech-BioImaging) Ministry of Health of the Czech Republic (15-25781a) and Czech Science Foundation (16-02870S).

6Po05

THERMORESPONSIVE SELF-ASSEMBLED BLOCK COPOLYMERS AS CONTRAST AGENTS FOR NON-INVASIVE MEDICAL IMAGING

Kristýna Kolouchová¹, Ondřej Sedláček¹, David Babuka¹, Daniel Jiráček², Jan Kotek³, Martin Hrubý¹

¹Institute of Macromolecular Chemistry AS CR, Heyrovského nám. 2, Prague 6, 162 06, Czech Republic, e-mail: kolouchova26@gmail.com

²Institute for Clinical and Experimental Medicine, Vídeňská 9, Praha 4, 140 21, Czech Republic

³Department of Inorganic chemistry, Faculty of Science, Charles University in Prague, Hlavova 8, Praha 2, 128 00, Czech Republic

Thermoresponsive diblock or triblock copolymers containing thermoresponsive and hydrophilic blocks are capable of forming

nanoparticles upon heating in aqueous solution. Our concept is to use for these applications diblock copolymers containing hydrophilic poly[N-(2-hydroxypropyl)methacrylamide] block stabilizing nanoparticles in aqueous environment and making them stealth against entrapment into reticuloendothelial system and thermoresponsive block based on poly(2,2-difluoroethyl acrylamide) with ferrocenyl moiety containing comonomer. Poly(2,2-difluoroethyl acrylamide) may be visualized by ^{19}F magnetic resonance imaging (MRI) (see Figure 1) while ferrocene moiety introduces redox switch sensitive to reactive oxygen species (ROS), overproduction of which is typical for inflamed and solid tumor tissues. Should such system be injected in the body, it forms micelles and as soon as such micelles get into ROS-rich environment, ferrocene is oxidized to paramagnetic ferricinium changing ^{19}F -MRI signal thus allowing functional imaging of ROS-rich tissues. Expected endotoxin-scavenging activity of the copolymers after oxidation should help in the case of gramnegative bacteria-caused inflammations.

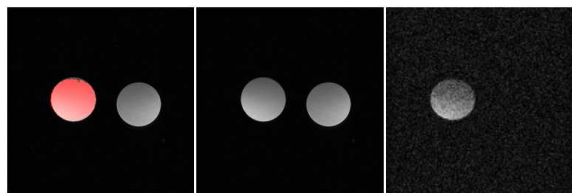


Figure 1. ^{19}F MRI of copolymers: ^1H and ^{19}F MR imaging of the phantom containing aqueous poly(2,2-difluoroethyl methacrylamide) solution (5 mg/mL polymer), the right tube containing only water serves as a reference. Merged ^{19}F and ^1H MR image (left), ^1H MR image (middle) and ^{19}F MR image (right).

Financial support of the Czech grant foundation (Grant 16-03156S), Ministry of Education, Youth and Sports of Czech Republic (Grants LM2015064 and LO1507) is gratefully acknowledged.

6Po06

PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE SCAFFOLDU PRO KOSTNÍ TKÁŇOVÉ INŽENÝRSTVÍ

Lucie Kománková¹, Martin Pařízek², Helena Hlídková¹, Martin Hrubý¹, Miroslav Vetrík^{1*}

¹Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v. v. i., Heyrovského nám. 1888/2, 162 00 Praha 6, Česká republika

²Fyziologický ústav AV ČR, v. v. i., Vítězská 1083, 14220 Praha 4, Česká republika

*e-mail: vetrík.miro@gmail.com

Kostní tkáňové inženýrství se zabývá vývojem biokompatibilních materiálů vhodných

k nahrazení defektní kostní tkáně [1]. Kostí představují velice dynamickou strukturu a její pochopení je základem pro návrh materiálů co nejvěrněji imitujících extracelulární matrix [2].

Byl připraven porézní 3D materiál na bázi uhlíku, který byl vytvářen termickou modifikací polyakrylonitrilu při 360°C za přístupu vzduchu. Komunikující póry o velikostech vhodných pro růst a proliferaci lidských osteoblastů byly ve struktuře vytvořeny zabudováním a následným vymytím částic porogenu. Jeho morfologická struktura je tvořena interkonektivními póry a byla charakterizována pomocí elektronové mikroskopie. Jako porogen byly zvoleny frakcionované krystaly chloridu sodného o vhodné velikosti. Ke zlepšení mechanických vlastností byl materiál vyztužen sekundární interpenetrující sítí z chitosanu. Na navrženém materiálu a jeho kompozitu s hydroxyapatitem byla v biologických experimentech zkoumána jejich osteokonduktivita. Ukázalo se, že materiály nejsou cytotoxické a jejich chemické složení a morfologická struktura podporují adhezi, proliferaci a růst buněk lidského osteosarkomu kmene MG 63, které na povrchu scaffoldů vytvářely konfluentní vrstvu.

[1] Fuchs, J.R., B.A. Nasser, and J.P. Vacanti, *Tissue engineering: a 21st century solution to surgical reconstruction*. Ann Thorac Surg, 2001. 72(2): p. 577-91.

[2] Fisher, J.P., A.G. Mikos, and J.D. Bronzino, *Tissue Engineering*. 2007: CRC Press.

6Po07

ANTIMIKROBIÁLNĚ POLYMÉRNE NANOKOMPOZITY

Mária Kováčová¹, Zoran Marković¹, Petr Humpolíček², Marián Lehocký², Pavel Kubát³, Helena Švajdlénková¹, Zdenko Špitálský¹

¹Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava 45, m.kovacova@savba.sk

²Centrum polymerních systémů, Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Tr. Tomáše Bati 5678, 760 01 Zlín

³Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v. v. i., Dolejškova 2155/3, 182 23 Praha 8

Připravili sa polymérne kompozity s uhlíkovými kvantovými bodkami (carbon quantum dots; CQDs) s veľkosťou cca 5 nm. Pripravené nanokompozity boli testované na antimikrobiálny účinok voči závažným nemocničným baktériám, meticilín-rezistentným *Staphylococcus aureus* a *Escherichia coli*. CQDs začlenené v polymérnej matici vykazujú silnú emisiu singletového kyslíka stanovenú elektrónovou paramagnetickou rezonanciou a blízkou infračervenou

fluorescenciou. Štruktúra polymérneho kompozitu bola charakterizovaná rastrovacou elektrónovou mikroskopiou a FTIR spektroskopiou.

Použitie takýchto materiálov má svoje využitie hlavne v nemocničných zariadeniach a ich vybaveniach (napr. rúčky na posteliach, stolíky nad posteľou, splachovadlá, sanitky, atď.), ktoré môžu byť hlavným zdrojom potenciálnej nákazy.

Pod'akovanie: Výskum bol podporený z projektu SASPRO č. 1237/02/02, ktorý je spolufinancovaný Európskou komisiou zo schémy „Spolufinancovanie regionálnych, národných a medzinárodných programov (COFUND)“, ktorý je súčasťou Akcií Marie Curie 7. rámcového programu EÚ, na základe grantovej zmluvy číslo 609427: SASPRO/Mobility Programme of Slovak Academy of Sciences: Supportive Fund for Excellent Scientists, ktorá je zverejnená v Centrálnom registri zmlúv SR a z projektu VEGA 2/0093/16. Tento výskum bol taktiež podporený agentúrou APVV – z bilaterálneho projektu SK-SRB-2016-0038 a multilaterálneho projektu DS-2016-0021.

6Po08

POLYMERS FOR BIMODAL IMMUNORADIO THERAPY – ARE THEY ABLE TO PROMOTE IMMUNE SYSTEM?

Lenka Loukotová¹, Jan Kučka¹, Mariia Rabyk¹, Anita Hoecherl¹, Kristýna Vencliková¹, Olga Janoušková¹, Rafal Konefal¹, Věra Kolářová², Luděk Šefc², Petr Štěpánek¹, Martin Hrubý¹

¹*Institute of Macromolecular Chemistry AS CR, v. v. i., Heyrovsky Sq. 2, Prague, 162 06, Czech Republic, lenci.l@seznam.cz*

²*Charles University in Prague, 1st Faculty of Medicine, Center for Advanced Preclinical Imaging, Salmovska 3, Prague, 120 00, Czech Republic*

Cancer immunotherapy has great potential to systemically eradicate tumor including metastasis exploiting body's own immune system with fewer and less severe side effects compared to other treatments. The conceptually new bimodal treatment is demonstrated with radiolabeled thermoresponsive β -glucan-graft-poly(2-isopropyl-2-oxazoline-co-2-butyl-2-oxazoline). The thermoresponsive polymer behavior in aqueous solutions has been studied showing appropriate cloud point temperature. The *in vitro* studies have been performed, the polymer has been found to be non-toxic and actively uptaken by cancer cells and macrophages. Moreover, oxidative burst assay has shown the immunostimulatory properties of prepared polymer. The polymer has been radiolabeled with ⁹⁰Y³⁺ and used in antitumor efficiency *in vivo*

experiment on mice bearing EL4 lymphoma. The immunoradiotherapy group (treated with the labeled polymer) has demonstrated very significant inhibition of tumor growth – 7 out of 15 mice have been cured in this group, while the others show significant survival time prolongation. The *in vivo* experiment demonstrates the synergic effect of immunoradiotherapy compared to only immunotherapy and radiotherapy.

The financial support of the Czech Science Foundation (grants # 16-02870S and 16-03156S); the Ministry of Health of the Czech Republic (grant # 15-25781a) and the Ministry of Education, Youth and Sports (grant # 7AMB16FR042) is gratefully appreciated. The research leading to these results has received funding from the Norwegian Financial Mechanism 2009-2014 under Project Contract no. - 28477/2014 – project 7F14009.

6Po09

KOMPOZITY NA BÁZE POLYETYLÉNU PLNENÉ BIODEGRADOVATELNÝM PLNIVOM

Zuzana Nógellová¹, Andrea Fečková¹, Mária Kováčová¹, Angela Kleinová¹, Michaela Sedničková¹, Ondrej Žigo¹, Zdenko Špitalský¹

¹*Ústav polymérov, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, zuzana.nogellova@savba.sk*

Práca bola zameraná na prípravu polyetylénových kompozitov s biodegradovateľným plnivom. Cieľom bolo zistiť, či plnivo napomáha degradácii polyetylénu po skončení životnosti polyetylénového materiálu. Vzorky sme podrobili degradácii v troch rôznych prostrediach: v komposte pri izbovej teplote, v komposte pri zvýšenej teplote a v morskej vode. Na hodnotenie degradácie sme použili rôzne metodiky: FTIR spektroskopia, meranie kontaktného uhla, dielektrická spektroskopia, stanovenie mechanických vlastností a sledovanie povrchu optickým mikroskopom. Zistilo sa, že prítomnosť biodegradovateľného plniva napomáha degradácii polyetylénových kompozitov, pričom sa výrazne nezhoršujú mechanické vlastnosti. Pri zvýšenej teplote je podľa očakávania nábeh degradácie výrazne rýchlejší než pri izbovej teplote.

Pod'akovanie: Táto práca vznikla za podpory projektu VEGA 2/0093/16.

6Po10 NOVÉ TYPY PROTIELEKTRÓD V SOLÁRNYCH ČLÁNKOCH

Jaroslav Kuliček¹, Michal Procházka¹, Matej Mičušík¹, Pavol Gemeiner², Milan Mikula², Aysegul Uygun Oksuz³, Mária Omastová¹

¹Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, Slovensko
maria.omastova@savba.sk

²Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovensko

³Suleyman Demirel University, 32260 Isparta, Turecko

Vo farbivom senzibilizovaných solárnych článkoch (dye-sensitized solar cells, DSSC) sa ako protielektróda (counter electrode, CE) najčastejšie využíva platina. Avšak medzi jej najväčšie nevýhody patria vysoká cena prípravy a korózia v prostredí kvapalného elektrolytu. V dnešnej dobe je veľká snaha nájsť možnosti nahradenia platiny inými materiálmi.

Táto práca sa zaoberá vytvorením vodivých kompozitov na báze mnohostenných uhlíkových nanotrubičiek (MWCNT) pokrytých vodivým polymérom – polypyrrolom (PPy). Kompozitné vrstvy boli pripravené na FTO substráte chemickou oxidačnou polymerizáciou s dvoma rôznymi tenzidmi [1], alebo priamou elektrochemickou depozíciou PPy na MWCNT upravený povrch FTO.

Chemické zloženie pripravených kompozitných povrchov bolo analyzované röntgenovou fotoelektrónovou spektroskopiou (XPS). Katalytická aktivita MWCNT/PPy elektród bola charakterizovaná pomocou cyklickej voltametrie a fotovoltické vlastnosti zostavených DSSC s pripravenými CE boli skúmané pomocou I-V meraní.

Na základe získaných výsledkov možno povedať, že pre potreby aplikácie v DSSC sa ako najzaujímavejšia CE javí kompozit MWCT/PPy pripravený chemickou oxidačnou polymerizáciou so 70 hm.% PPy, ktorý v solárnom článku dosiahol len o 30% nižšiu účinnosť konverzie ($\eta = 4,9\%$) v porovnaní so štandardnou platinovou CE ($\eta = 7,1\%$).

Táto práca bola podporovaná projektami VEGA 02/0149/14, SAS - TUBÍTAJRP 2014/2 a COST MP 1307.

[1] P. Gemeiner, J. Kuliček, M. Mikula, M. Hatala, L. Švorc, L. Hlavatá, et al., Polypyrrole-coated multi-walled carbon nanotubes for the simple preparation of counter electrodes in dye-sensitized solar cells, *Synth. Met.* 210 (2015) 323–331.

6Po11 JOINING OF RUBBER SUBSTRATE WITH BRONZE SURFACE BY THE METHOD OF MOLECULAR ADHESION

Jan Oravec¹, Jozef Preto¹, Hidetoshi Hirahara², Jing Sang², Jan Hronkovic¹, Pavol Melus¹

¹VIPO a.s.ul. gen. Svobodu, 95801 Partizanske, Slovakia, joravec@vipo.sk

²Department of Frontier Materials and Function Engineering, Graduate School of Engineering, Iwate University, 4-3-5 Ueda, Morioka 020-8551, Japan

During the adhesion process using the adhesives there are many risks of defects caused by boundary stress, strength and to resolve these traditional adhesive problems a method called molecule adhesion technology^{1,2}, was used.

This method can successfully adhere different materials and has the advantages such as material independence and strong adhesion strength without any adhesive agent. The impact of selected coupling agents on the green and final adhesion on the boundary bronze surface – natural rubber based coating blend was studied in the presented work. Wires of bronze (Cu/Sn 96:4) coated steel bead wire were submerged in solutions of coupling agents in ethanol for 30 s at various temperature and dried. The effect of the surface modification was evaluated by measuring of XPS, FT-IR, the morphology of the brass plate surfaces after the treatment was studied by the atomic force microscopy (AFM).

The adhesion properties of treated surfaces to rubber compound were assessed by wire pool out test. The results of the tests demonstrated that the most suitable coupling agents as far as the green adhesion of unvulcanised rubber are those, which contain sulphur in their molecular structure.

Acknowledgement: This publication was supported by the Slovak Research & Development Agency, project No. APVV-I5-0113.

[1] Hirahara H., Aisawa S., Mori K., Narita E., Oishi Y.: Surface and interface analysis. 953, 35 (2003).

[2] Mori K., Shi X., Hirahara H., Oishi Y.: Rubber chemistry and technology. 1019, 76 (2003).

6Po12**BISDECYLSEXITHIOPHENE-POLYETHYLENE OXIDE COPOLYMER NANODOMAIN THEORETICAL MODELLING: MORPHOLOGY AND PHOTOPHYSICS**

T. Palszegi¹, E. Jane², J. Sepelak², D. Repovsky², I. Bugar³, G. Cik⁴, D. Velic^{2,3}

¹ *TheMatExp, Fedinova 22, 85101 Bratislava, Slovakia,*

² *Department of Physical and Theoretical Chemistry, Comenius University, Mlynska dolina, 842 15 Bratislava, Slovakia*

³ *International Laser Centre, Ilkovicova 3, 841 04, Bratislava, Slovakia*

⁴ *Department of Environmental Sciences, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinskeho 9, 812 37 Bratislava, Slovakia*

Nanodomain morphologies and the related electronic (exciton) photophysics of bisdecylsexithiophene (bd6T) rods and polyethylene oxide (PEO) coils formed alternating multiblock bd6T-alt-PEO copolymer are studied theoretically and computationally in relation with our recent paper [1]. Free energies of puck (spherical), cylindrical and lamellar rod-coil micelles of bd6T-alt-PEO copolymer are derived and special cases of their rod number and coil length dependences are analyzed. Fluorescence excitation spectra are computationally modelled by one-exciton quasi-band absorption spectra of bd6T-alt-PEO copolymer micelle cores, formed by bd6T rod aggregates, for different numbers, spatial distributions and tilting statistics of the rods. The corresponding ultrafast time-dependent fluorescence of the bd6T is correlated with calculated exciton transfer and relaxation dynamics, as well as radiative emission of one-exciton quasi-bands of bd6T aggregate nanodomains. The steady-state fluorescence emissions of these rod nanodomains are calculated by integration of their simulated one-exciton quasi-band ultrafast time-dependent fluorescence.

The work was supported by APVV-15-0201, Grant of Comenius University 499/2010, meta-QUTE and VEGA1/0501/15

[1] T. Palszegi, J. Sepelak, E. Jane, D. Repovsky, V. Szocs, I. Bugar, G. Cik and D. Velic, Correlation of Nanodomain Morphology and Ultrafast Fluorescence Dynamics in Bisdecylsexithiophene-Polyethylene Oxide Copolymer Film, *J. of Photochem. and Photobiol. A: Chemisry* 343 (2017), 103-111

6Po13**SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF NEW AMPHIPHILIC BLOCK-GRADIENT COPOLYMERS OF STYRENE AND 2-DIMETHYLAMINOETHYL ACRYLATE**

M. Rabyk¹, E. Deniau², L. Billon², O. Borisov², M. Hruby¹, P. Stepanek¹

¹ *Institute of Macromolecular Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, Heyrovský Sq. 2, 162 06 Prague 6, Czech Republic (rabyk@imc.cas.cz)*

² *Institut des Sciences Analytiques et de Physico-Chimie pour l'Environnement et Matériaux, Université Pau et Pays de l'Adour, France*

Self-assembled nanoaggregates of amphiphilic block copolymers attract strong research interest due to a large number of potential applications in different fields ranging from agrochemistry to nanomedicine. The size and morphology of such nanoaggregates strongly depends on the intramolecular hydrophobic-hydrophilic balance [1]. Important feature of amphiphilic copolymers is an ability to respond for some external stimuli such as varying pH, ionic strength and temperature. The response to a specific external stimulus depends on the nature of monomeric unit constituting the copolymer. One of the most perspective applications of such amphiphilic copolymers is the design of intelligent nanocontainers, which can be used for controlled release of the encapsulated substance as a response to specific locally acting stimuli [2].

The goal of the present work is a synthesis and characterization of the novel type of multi-responsive block-gradient copolymers based on 2-dimethylaminoethyl acrylate and styrene, using nitroxide-mediated controlled radical polymerization. Preparation procedure and determination of copolymerization parameters (reactivity ratios) as well as investigation of self-assembling behaviour of synthesized polymers in aqueous media will be shown.

Financial support from the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (grants # 7AMB15FR039 and LM2015064 ERIC) is gratefully acknowledged. The research leading to these results has received funding from the Norwegian Financial Mechanism 2009-2014 under Project Contract no. - 28477/2014 – project 7F14009

[1] Borisov O. V., Zhulina E. B. et al., *Adv. Polym. Sci.*, 241, 57-129, 2011.

[2] Deniau-Lejeune E., Drechsler, M., Jestin, J., Müller A.H.E., Chassenieux C., Colombani O. *Macromolecules*, 43, 2667-2671, 2010.

6Po14**SYNTEZA A CHARAKTERIZACE 6-AMINOHYLURONANU**Petra Šedová¹, Radovan Buffa¹¹Contipro, a.s., 561 02 Dolní Dobrouč,
petra.sedova@contipro.com

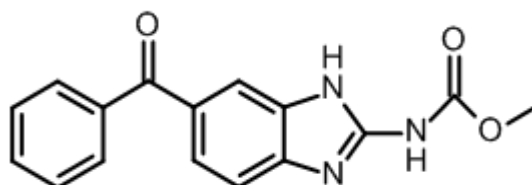
Lineární neutrální polysacharid hyaluronát sodný (HA) je rozšířený biopolymer v nervových, epitelových i pojivových tkáních. Jeho vlastnosti závisí na molekulové hmotnosti polymeru. Zatímco hyaluronan s vysokou molekulovou hmotností plní funkci při organizaci extracelulární matrix, hyaluronan s molekulovou hmotností pod 200 kDa funguje jako signální molekula. Pro zavádění aktivních substancí či zesílení polymerních řetězců je potřebná reaktivní funkční skupina. Kromě karboxylové skupiny přirozeně přítomné v hyaluronové kyselině se v hyaluronanu jiné reaktivní skupiny nevyskytují. Jednoduchou dvoukrokovou modifikací se podařilo do hyaluronanu zabudovat reaktivní aminoskupinu. Hyaluronan byl nejprve oxidován systémem NaOCl/AcNH-TEMPO/NaBr na polyaldehyd HA1 a ten byl modifikován reduktivní aminací s octanem amonným. Přítomná aminoskupina byla potvrzena pomocí 2D NMR spektroskopii (signály diastereotopních protonů: CH₂-NH₂ (3,04/2,76 ppm), C:40,4 ppm).

[1] Petra Šedová, P., Buffa, R., Kettou, S. et al. CarbohydrRes, 371, 8 (2013).

6Po15**MEBENDAZOL: OD LÉČBY PARAZITÁRNÍCH INFEKČÍ PO TERAPII NÁDORŮ**Martin Studenovský,¹ Viktor Černý,² Ladislav Sivák²¹Ústav makromolekulární chemie AV ČR,
Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6, Česká
Republika²Mikrobiologický ústav AV ČR, Vídeňská 1083, 142 20
Praha 4, Česká Republika

Ačkoli je terapie nádorových onemocnění stále efektivnější, dlouhodobá úspěšnost léčby nepřesahuje 50%. Tato skutečnost motivuje intenzivní výzkum nových protinádorových léčiv a léčebných postupů. Jednou z možností vývoje nových léčiv je vazba léčiv s prokázanou cytotoxicitou na rozpustný polymerní nosič zabezpečující přednostní dopravu léčiva do nádoru. V této práci jsme použili jako léčivo derivát benzimidazolu mebendazol, který je více jak 40 let používán v humánní i veterinární

medicině pro léčbu střevních parazitárních infekcí (Vermox, Emverm, Mebendazole). Protinádorová aktivita mebendazolu byla poprvé zdokumentována v r. 2002 [1] a později byl popsán jeho účinek proti široké škále nádorů (kolorektální karcinom, melanom, plicní nádory a další) [2]. Plnému využití cytostatického potenciálu mebendazolu však brání jeho nerozpustnost ve vodném prostředí a tedy nemožnost parenterálního (intravenózního) podání. Předmětem studie je příprava rozpustných polymerních konjugátů na bázi kopolymeru *N*-(2-hydroxypropyl)metakrylamidu (HPMA) [3] s mebendazolem navázaným hydrolyticky labilní vazbou, jejich fyzikálně chemická charakterizace a ověření jejich protinádorové aktivity *in vitro* a *in vivo*. Dosud připravené konjugáty vykazují vysokou cytotoxicitu pro vybrané nádorové buněčné linie a rovněž se vyznačují i slibnou *in vivo* protinádorovou aktivitou na některých myších nádorových modelech. Cílem je získání polymerního konjugátu mebendazolu stabilního v krevním řečišti a rychlým uvolněním léčiva uvnitř nádoru či v nádorové buňce.

**Mebendazol**

Tato práce je realizována díky finanční podpoře Grantové agentury České republiky (grant 17-13283S).

- [1] T. Mukhopadhyay, J. Sasaki, R. Ramesh, J. A. Roth, *Clin Cancer Res.* 8(9), 2963-9 (2002).
- [2] J. Sasaki, R. Ramesh, S. Chada, Y. Gomyo, J. A. Roth, T. Mukhopadhyay, *Mol. Cancer Ther.* 1(13), 1201-9 (2002).
- [3] Ulbrich, K., Subr, V., Strohalm, J., Plocova, D., Jelinkova, M., Rihova, B., *J. Controlled Release.* 64, 63-79 (2000).

6Po16**BIOLOGICAL EFFECT OF BEECH GLUCURONOXYLAN SULFATES**

Turjan J.¹, Pujol C.A.², Damonte E.B.², Kozák J.¹, Capek P.¹

¹ Department of Glycomaterials, Institute of Chemistry, Center for Glycomics, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, Bratislava, Slovakia, chemtur@savba.sk

² Laboratorio de Virología, Departamento de Química Biológica, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Ciudad Universitaria, Pabellón 2, Piso 4, Buenos Aires, Argentina

Glucuronoxylans are the major hemicellulose polysaccharides of hardwoods. The backbone of this polymer consists of approximately two hundred xylopyranosyl residues interconnected by β -(1,4)-linkages, partly acetylated at positions C-2 and C-3. Most of the hardwood glucuronoxylans contain, on the average, one 4-*O*-methylglucuronic acid per ten xylopyranosyl residues, α -(1,2)-linked to the main xylan chain [1]. Glucuronoxylans are still an interesting group of polysaccharides for potential industrial applications. Attention is therefore drawn to these biopolymers because they are readily extractable from hardwoods in a relatively pure form. Various derivatives, their biological activities (antioxidant, antitumor, anti-inflammatory, antitussic, anticoagulant, etc.) are therefore being studied to utilize these glucuronoxylans in pharmacy, medicine or in another industrial area [2].

The aim of this study is to verify the possible effect of glucuronoxylan derivatives, differing in molecular weight and degree of derivatization against HSV (human Herpes simplex virus) types 1 and 2, DENV (Dengue virus) and PV (Polio virus) causing oral, genital and neurological infections, dengue fever, dengue hemorrhagic fever in humans or poliomyelitis [2,3].

Study was supported by the Slovak Scientific Grant Agency VEGA (grant no. 2/0018/15) and the Slovak Research and Development Agency (grant no. 0305/12).

- [1] A. Ebringerová, Z. Hromadková, T. Heinze, Adv. Polym. Sci., 186 (2005), 1–67.
- [2] R.J. Whitley, B. Roizman, Herpes simplex viruses D.D. Richmann, R.J. Whitley, F.G. Hayden (Eds.), Clinical Virology (third ed.), ASM Press, Ltd., Washington (2009), 409–436.
- [3] C.A. Pujol, E.B. Damonte, J. Turjan, P. Capek, Int. J. Biol. Macromol. 87 (2016), 195–200.

6Po17**INFLUENCE OF POLAR GROUPS GRAFTING TO METALLOCENE POLYOLEFINS ON HOT MELT ADHESIVE PROPERTIES IN PACKAGING INDUSTRY**

Juraj Pavlinec¹, Ivan Chodák¹, Igor Novák¹, Vladimír Vanko², Jozef Preťo²

¹ Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 84541 Bratislava, Slovakia

² VIPO, a.s., Partizánske, Slovakia
vvanko@vipo.sk

Metallocene polyolefins are frequently used for hot melt adhesives. For this aim the investigation of relations between the polymer structure and adhesive ultimate properties is necessary. The basic experiments consist in development of the material composition from commercially available components, and the targeted modifications of basic components are performed to enhance certain parameters of the adhesive. The metallocene polyolefin have been frequently modified to increase adhesive properties by polar grafting¹⁻³.

The aim of this work was the study of different ways of polar groups grafting to metallocene polymer – Resinex PE RXP 1502 from Dow chemical company and its influence on some hot melts properties. The polyolefin plastomer Resinex PE RXP 1502 (RXP) is metallocene copolymer of ethylene with an octene. Efficient way to initiate grafting is the accumulation of peroxide and hydroperoxide groups on polyolefin molecules by controlled thermal oxidation. As grafting agent mainly the acrylic acid (AA) was used. Based on past experience with the activation of polyolefins for vinyl monomer grafting with gaseous O₂ + O₃ mixture, we used this way to accumulation peroxides also on RXP molecules. Polymer powder was exposed to a flow of reaction gas producing in an atmospheric plasma generator. Activation time was 3, 2 and 1 hour. The concentration of peroxide oxygen determined by iodometric method after 3 hours of modification was 0.0098, and 0.0084 mol/kg. It is sufficient concentration for initiation of AA grafting.

RXP grafting in heterogeneous system, in toluene solution and in molten state was investigated. RXP grafting in the molten state shows as the most effective RXP polymer modification. Relatively stable RXP peroxides formed by oxygen-ozone mixture (marked decomposition above 100°C), the AA boiling point 141 °C and solvents absence give choice of

favorable polymer grafting conditions with high efficiency.

Adhesive properties were evaluated by measuring the peel strength and temperature resistant of the adhesive joints on laminated paper with BOPP foil used in packaging industry. The peel strength and temperature resistant of adhesive joints changed significantly. The present of acrylic acid in the formulation in very small quantities below 0,15wt% caused significant increase in peel strength 1, 8 times and temperature resistant was increased 1, 2 times.

The authors are grateful for financial support to the Slovak Research and Development Agency projects No. APVV-14-0566.

- [1] Yalvac S., Karjala T., O'Bryan E.: Adhesives & Sealants Industry 12, 34 (2005).
- [2] Patel J. B., Eodice A. K., Low Y. G.: Low application temperature hot melt adhesive. PCT/US 2010/043804 (2010).
- [3] Davis K. T.: Olefin-based hot melt adhesive compositions and nonwoven and packaging articles including the same. US20120329353 (2012).

POSTERY - SEKCIA 7 JADROVÁ CHÉMIA

7Po01

PŘÍPRAVA PALIV TYPU CERCER „METODOU PAN“

Kryštof Adámek, Ferdinand Šebesta, Ivo Jakubec*

Břehová 78/7, 115 19 Praha 1-Staré Město,
krystof.adamek7@gmail.com

*Ústav anorganické chemie AV ČR, V.V.I., Husinec-
Řež 1001, 250 68, Řež

Cílem této práce byl vývoj a ověření nového postupu přípravy paliva typu CERCER s maticí oxidu hořečnatého pomocí metody využívající polyakrylonitril (PAN). Práce byly prováděny v rámci projektu ASGARD [1], bakalářské práce [2] a navazujícího výzkumného úkolu. Byly připraveny sintrované pelety obsahující oxidy Ce (model Pu) a Eu (model Am) v matici MgO. Využívána byla infiltrace roztoků Ce a Eu do kuliček MgO-PAN. Připravené pelety i všechny intermediální produkty byly charakterizovány pomocí rentgenové práškové difrakce. Tímto postupem se podařilo připravit homogenní pelety o vysoké hustotě.

- [1] Seventh Framework programme, 2011, THEME [Fission-2011-2.3.1], *R&D activities in support of the implementation of the Strategic Research Agenda of SNE-TP, Annex I – „Description of work“*, Advanced fuels for Generation IV reactors: Reprocessing and Dissolution.
- [2] ADÁMEK, K.: *Studium přípravy prekurzorů paliva typu CERCER a CERMET*. Bakalářská práce, ČVUT-FJFI, 2016.

7Po02

ZNAČENÍ BRASSINOSTEROIDŮ TEŽKÝMI IZOTOPY VODÍKU

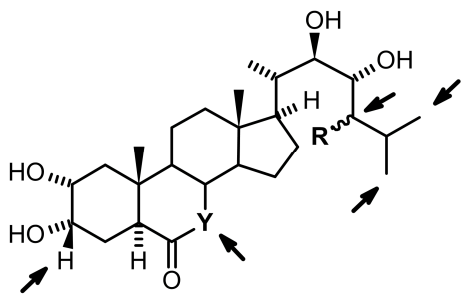
Břetislav Brož, Aleš Marek

Laboratoř radioizotopů, Ústav organické chemie
a biochemie AV ČR v.v.i.,
Flemingovo náměstí 2/542, 16610 Praha 6,
Bretislav.Broz@uochb.cas.cz

Brassinosteroidy, nejnovější třída více jak 70 fytohormonů obsahujících 5 α -cholestanový skelet, mají vliv na celou řadu rostlinných regulačních funkcí a ovlivňují tak např. růst a dělení buněk, kvalitu a množství semen, nebo toleranci ke stresovým vlivům. Biologická aktivita brassinosteroidů je mimořádná, kromě uvedených účinků byla také u některých zástupců popsána např. i účinná regulace růstu zvířecích i lidských buněčných nádorových linií bez ovlivnění růstu normálních buněk [1].

Nejvhodnější metodou, jak sledovat mechanismy biologických účinků sloučenin na molekulární úrovni, je značení radioaktivními izotopy - tímto způsobem je zajištěno zachování identity molekulární struktury společně s mimořádně vysokou detekovatelností ve tkáních. Vzhledem k obecně velmi nízkým koncentracím receptorů ve studovaných biologických materiálech, vyžaduje tento přístup co nejvyšší specifickou aktivitu sledovaných derivátů.

Tato práce se věnuje způsobům značení vybraných brassinosteroidů a příbuzných derivátů pomocí těžkých izotopů vodíku [1-3]. Diskutovány budou detailní podmínky příprav a efektivita obohacení derivátů pomocí jednotlivých metod vyvinutých v naší laboratoři.



- 24-epibrassinolide (1): R = Me[▲], Y = OCH₂
 24-epicastasterone (2): R = Me[▲], Y = CH₂
 28-homocastasterone (3): R = Et[▲], Y = CH₂

Obr. 1. Isotopově značené brassinosteroidy (1-3). Šipky naznačují jednotlivé strategie pro značení pomocí deuteria a tritia na dané pozici.

Autoři děkují Akademii věd ČR za finanční podporu v rámci projektu RVO: 61388963. Tato práce dále vznikla za podpory Grantové agentury AV ČR (grant IAA400550801).

- [1] A. Marek, M. R. Patil, T. Elbert; *RSC Adv.*, **2015**, 5, 65214–65220.
 [2] A. Marek, B. Klepetářová, T. Elbert; *Tetrahedron*, **2015**, 71, 4874–4882.
 [3] T. Elbert, M. R. Patil, A. Marek; *J. Label Compd. Radiopharm.*, **2017**, 60, 176–182.

7Po03

ANALÝZA PRAVĚKÉHO NÁRAMKU METODOU FOTONOVÉ AKTIVAČNÍ ANALÝZY

Ivana Krausová¹, Jan Tajer², David Chvátíl¹

¹Ústav jaderné fyziky AV ČR, v.v.i., Řež 130, 250 68 Husinec-Řež, Česká republika
 krausova@ujf.cas.cz

²Muzeum Karlovy Vary, Nová louka 23, 360 01 Karlovy Vary, Česká republika

Instrumentální fotonová aktivační analýza (IPAA) je vhodnou radioanalytickou metodou pro nedestruktivní stanovení celkového dusíku v různých matricích. Klasické analytické metody představují rizika ztrát a kontaminace, protože vyžadují rozklad, rozpouštění a chemické převedení dusíku do jeho aniontové formy a v materiálech obsahujících několik specií dusíku představují komplikace zejména v nedostatečné identifikaci konkrétní formy a tím ovlivnění jeho výsledného obsahu [1].

Stanovení dusíku metodou IPAA je založeno na jaderné reakci ¹⁴N (γ, n)¹³N po ozáření vysokoenergetickými fotony [2].

Analyticky využitelný produkt této fotojaderné reakce je pozitronický zářič emitující pouze nespécifické anihilační záření 511 keV, které

může být emitováno i dalšími radionuklidy přítomnými ve vzorku. Některé z nich kromě nespécifické linky 511 keV emitují i specifické linky, díky kterým lze jejich příspěvek k analytickému radionuklidu ¹³N odečíst. Účinným zdrojem vysokoenergetického fotonového záření je sekundární brzdné záření vznikající konverzí svazku elektronů urychlených vysokofrekvenčním kruhovým urychlovačem – mikrotronem [1, 2].

Nedestruktivní IPAA přispěla k objasnění původu pravěkého náramku (obr.1), pocházejícího z hradiště v katastru Karlových Varů - Drahoovicích z pozdní doby bronzové [3].



Obr. 1. Pravěký náramek.

Tato studie byla podpořena Grantovou agenturou ČR v rámci projektu reg. č. P108/12/G108.

- [1] I. Krausová: Krátkodobé produkty fotojaderných reakcí a jejich využití ve fotonové aktivační analýze, dizertační práce, FJFI ČVUT, 2015.
 [2] Ch. Segebade, H. P. Weise, G. J. Lutz: Photon Activation Analysis, Walter de Gruyter, 1988.
 [3] J. Klsák, F. Prekop, L. Svoboda, P. Šebesta, J. Tajer: Karlovy Vary – Drahovice – pozdně bronzové hradiště, 100 let terénní archeologie v Karlovarském kraji, Karlovy Vary, 2011.

7Po04

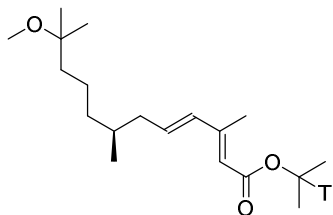
SYNTÉZA TRITIEM ZNAČENÉHO (S)-METHOPRENU

Aleš Marek

Ústav Organické Chemie a Biochemie AV ČR, v.v.i., Flemingovo nám. 2, Prague 6, 16610, Česká republika
 marek@uochb.cas.cz

Methopren jakožto analog tzv. juvenilních hormonů ovlivňujících vývojové stadium larvy před finální přeměnou v dospělý hmyz, je v latinské americe masivně aplikován jako insekticid – dispergován na vodní plochy, a to včetně reservoárů pitné vody. Tento regulátor růstu byl doposud považován za netoxický vůči

savcům. Pro další studium jeho aktivity v konkrétních vazebných ligand-receptorových studiích bylo nezbytné jeho označení radioaktivním isotopem o vysoké specifické aktivitě (SA). V příspěvku bude prezentována syntéza vedoucí k dostatečně vysoké SA odpovídající 14.0 Ci/mmol.



Obr. 1. [^3H]-(*S*)-Methopren.

Author děkuje České Akademii Věd za finanční podporu tohoto projektu (RVO: 61388963).

7Po05 NEUTRONOVÁ AKTIVAČNÍ ANALÝZA POZDŇEGLACIÁLNÍCH JEZERNÍCH SEDIMENTŮ

Jiří Mizera¹, Václav Procházka², Günther Kletetschka^{2,3}

¹Ústav jaderné fyziky AV ČR, v.v.i., Hlavní 130, 25068 Řež

²Ústav hydrogeologie, inženýrské geologie a užité geofyziky, Přírodovědecká fakulta UK, Albertov 6, 12843 Praha 2

³Geologický ústav AV ČR, v.v.i., Rozvojová 269, 16500 Praha 6

Náhlé ochlazení a úhyn velkých savců na začátku mladšího dryasu (12800 BP) je často spojováno s katastrofickou událostí, např. s extrémní sopečnou činností nebo s pádem velkého meteoritu (impaktem). Cílem geochemické charakterizace sedimentů odebraných z paleojezera Stará Jímka u Prášílského jezera na Šumavě ze stratigrafického profilu datovaného kolem tohoto období bylo ověřit možný impaktní původ mikroskopických, často magnetických sférul vyskytujících se v těchto sedimentech ve vrstvě klastického materiálu (tefry) pocházejícího evidentně z výbuchu německého vulkánu Laacher See před 12900 lety. Metodami instrumentální neutronové aktivační analýzy bylo stanoveno více než třicet prvků v šestnácti vzorcích sedimentů (duplikované vzorky z osmi stratigrafických pozic). Velmi nízké, poddetekční obsahy Ir v analyzovaných sedimentech naznačují zanedbatelný vliv případného impaktu asteroidu ve sledovaném období. Impaktní původ nalezených mikrosférul je ale možný mechanismem vzduchové exploze podobné

explozi v Tungusce, kde se mikrosférule také vyskytují, ale bez anomálie platinových kovů v lokálních sedimentech. Ve vrstvě obsahující tefru z Laacher See se vulkanický materiál projevil především vysokými obsahy Na, Ca a Cl, nemůže však vysvětlit současně zvýšené poměry siderofilních prvků Co a Ni k litofilnímu Mg. Ty mohou být, kromě možné kontaminace meteoritickou hmotou, výsledkem nakoncentrování v autigenních sulfidech, tj. až po uložení sedimentů.

Studie byla realizována za podpory MŠMT v rámci infrastruktury CANAM (projekt č. LM2011019) a programu NÁVRAT (projekt č. LK21303), a podpory GAČR (projekt č. 17-05935S).

7Po06 SNÍŽENÍ RADIAČNÍ CITLIVOSTI MIKROORGANISMŮ OZÁŘENÝCH UV ZÁŘENÍM V PŘÍTOMNOSTI VYCHTÁVAČŮ OH RADIKÁLŮ

Barbora Neužilová¹ a Viliam Múčka¹

¹ČVUT v Praze, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, Katedra jaderné chemie, Břehová 7, 115 19 Praha 1, b.neuzilova@gmail.com

Živé organismy jsou převážně tvořeny vodou. Jejich ozařováním ionizujícím zářením dochází k radiolýze vody a vzniku toxických OH radikálů. Mezi vychytávače těchto radikálů patří methanol a ethanol, které snižují radiační citlivost buněk [1]. Pomocí Frickeho dozimetru bylo prokázáno, že ozařováním UV(C) zářením (254 nm) vznikají v ozařované suspenzi OH radikály [2].

Studie se zabývá mírou radiační ochrany kvasinek *Saccharomyces cerevisiae* DBM 272 ozářených UV zářením vychytáváním hydroxylových radikálů methanolem a ethanolem. Ozáření bylo charakterizováno nominálními dávkovými rychlostmi v intervalu 11 - 42 Gy/h a dávkou 1 Gy. Zdrojem UV záření byla rtuťová výbojka Philips TUV 11W, UV Technik Meyer, GmbH. Míra radiační ochrany buněk způsobená vychytáváním OH radikálů byla definována jako směrnice závislosti ochranného účinku σ (poměru přirozených logaritmu frakcí přeživších buněk bez vychytávače a s vychytávačem) na vychytávací účinnosti vychytávače Q .

Bylo prokázáno, že jedním z cidních mechanismů, kterým UV(C) záření působí na živé buňky, je tvorba OH radikálů nebo dalších reaktivních forem kyslíku. Ochranný účinek σ roste lineárně s vychytávací účinností protektorů

v intervalu vychytávacích účinností $(0 - 4) \cdot 10^9$ s⁻¹. Oba vychytávače se aktivně podílejí na ochraně buněk. Míra radiační ochrany klesá s dávkovou rychlostí UV záření u obou vychytávačů. Tepelný stres kvasinek *Saccharomyces cerevisiae* (50 °C, 20 minut) před jejich ozářením neovlivňuje míru radiační ochrany, ani celkovou ochranu buněk studovanými vychytávači.

Tato práce vznikla za podpory grantu SGS17/195/OHK4/3T/14.

- [1] MÚČKA V., BLÁHA P., ČUBA V., ČERVENÁK J.: Int. J. Radiat. Biol., 89, 1045, (2013).
 [2] NEUŽILOVÁ, B.: Výzkumný úkol, ČVUT v Praze, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, Praha (2016).

7Po07

PŘÍPRAVA TERČOVÝCH MATERIÁLŮ S FLUORIDOVOU MATRICÍ KE STANOVENÍ ²³⁶U PROSTŘEDNICTVÍM URYCHLOVAČOVÉ HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIE

Tomáš Prášek, Irena Špendlíková, Mojmír Němec

ČVUT v Praze, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, Katedra jaderné chemie, Břehová 7, 115 19, Praha 1, Česká Republika
 tomasprasek@seznam.cz

Urychlovačová hmotnostní spektrometrie (Accelerator Mass Spectrometry, AMS) je vysoce citlivá analytická metoda vhodná pro stanovení velkého množství stabilních i radioaktivních nuklidů. Mezi významné aplikace AMS se v posledních letech řadí i analýza stopových a ultrastopových množství radionuklidu ²³⁶U v přírodních vzorcích. Nuklid

²³⁶U je pomocí AMS obvykle stanovován v terči s oxidickou matricí, nedávný výzkum však prokázal výhody fluoridových matric, nejčastěji s uranem ve formě UF₄ [1]. Příprava této sloučeniny v čisté formě bez využití plynné kyseliny fluorovodíkové je ale vysoce náročná a složení výsledného produktu významně závisí na podmínkách probíhající reakci.

Prezentovaná práce byla zaměřena na vývoj metody přípravy terčové sloučeniny s fluoridovou matricí potenciálně využitelné pro stanovení ²³⁶U prostřednictvím AMS. Krom čistoty vlastního produktu byl kladen důraz na jednoduchost postupu, reprodukovatelnost a také návaznost na předchozí zpracování vzorků.

Navrhovaná metoda spočívá v redukci šestimocného uranu ve vodném roztoku pomocí vhodného redukčního činidla, přidání neizotopického nosiče a následném vysrážení kyselinou fluorovodíkovou. Vzniklý intermediát je vysušen a poté žíhán pod redukční atmosférou. Nejvhodnější se přitom jeví mědi katalyzovaná redukce prostřednictvím hydrazin-dihydrochloridu za zvýšené teploty s vápníkem jakožto nosičem. Během žíhání intermediátu při 300 °C pak vzniká sloučenina NH₄U₃F₁₃, v níž nebyla zjištěna přítomnost kyslík obsahujících příměsí.

Tato práce vznikla za podpory grantu SGS15/216/OHK4/3T/14

- [1] Xianggao Wang, Kejun Dong, Ming He, Shaoyung Wu, Shan Jiang (2013) Nucl. Tech. 182, 235-241

POSTERY - SEKCIA 8 VYUČOVANIE A HISTÓRIA CHÉMIE

8Po01

INTERAKTIVNÍ APLIKACE PRO SAMOSTUDIUM ORGANICKÉ CHEMIE

Daniel Barton¹, Radek Cibulka¹, Ondřej Kunderát¹,
Markéta Rybáčková¹, Miroslav Šimek¹, Martin
Mastný¹

¹*Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5,
16628 Praha 6*

daniel.barton@vscht.cz

S rozvojem distančního vzdělávání a online kurzů v poslední době je třeba, aby byl kladen důraz na kvalitu, interaktivitu a použitelnost těchto online materiálů a aplikací. Na VŠCHT

Praha proto vznikla cvičebnice, která umožňuje studentům procvičování různých odvětví organické chemie pomocí chemického kreslicího editoru. Odpovědi studentů jsou ihned kontrolovány a vyhodnocovány a v případě špatných odpovědí jsou prezentovány nápovědy a správné odpovědi. To spolu se sběrem dat veškerých odpovědí pomáhá studentům v procesu učení a pedagogům k vytváření efektivnějších zadání otázek tím, že mohou reagovat na aktuální odpovědi. Aplikace je od roku 2014 veřejně dostupná na e-learningovém portálu univerzity (e-learning.vscht.cz/och) a od té doby prošla mnoha modernizacemi. Poslední aktualizací je její kompletní anglická verze z roku 2016 a rozšíření počtu úloh na více jak 800 ze stejného roku.

Tento projekt vznikl za podpory Pedagogické interní grantové agentury na VŠCHT, Praha

POSTERY - SEKCIA 9 ŽIVOTNÉ PROSTREDIE, POTRAVINÁRSTVO A BIOTECHNOLÓGIE

9Po01

REMOVAL OF METALS FROM WATER USING SULFUR-OXIDIZE AND SULFATE- REDUCING BACTERIA

Zuzana Blažková, Vojtěch Trousil, Iveta Stanová, Jiří
Palarčík, Miloslav Slezák, Jiří Čákl

*Department of environmental and chemical
engineering, Faculty of Chemical Technology,
University of Pardubice, Studentská 573, 532 10
Pardubice*

Zuzana.Blazkova@upce.cz

In these days, microbial processes are very popular for water treatment, because these methods can be environmental friendly and cheaper than traditional processes of water cleaning. This work is focused on one of them - to removal of metals, whose sulfides are insoluble, from industrial waste water using sulfur-oxidizing and sulfate-reducing bacteria.

For removal of undesirable metals from water, there was suggested a plant with three flow-through columns and all of them had individual function. The columns can be filled with specific filling, which can be used as source of electrons for metabolic processes of bacterial cells while as a carrier of bacterial biomass. The first column was used to create optimal conditions for sulfur-oxidize bacteria and solution of their metabolites was flown into the second one. In the second column was grown sulfate-reducing bacteria to create precipitants. In the third column was mixed liquids from the second column and cleaned water with undesirable metals. The precipitation reaction was in the third column out of bacterial cells.

The experiments were in suggested plant for 300 days and in this period, effective removal of metals from water was observed.

This work was supported by Ministry of Education, Youth and Sports (SGS_2017_002) and Technology Agency of Czech Republic (TA04020258).

9Po02**KOMPLEXNÁ IZOLÁCIA LÁTOK S VYSOKOU PRIDANOU HODNOTOU Z PLANTAGO LANCEOLATA**

Alžbeta Chochulová¹, Vladimír Štefuca², Janka Kubincová¹, Jozef Višňovský³

¹Alžbeta Chochulová, Janka Kubincová, Axxence Slovakia s.r.o., Mickiewiczova 9, 81107 Bratislava, Slovakia

²Vladimír Štefuca, Institute of Biotechnology, Faculty of Chemical and Food Technology, University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, 81237 Bratislava, Slovakia

³Jozef Višňovský, SynthCluster, s.r.o., Komenského 14, 90001 Modra, Slovakia

Spoločnosť Axxence Slovakia s.r.o. sa zaoberá výrobou, výskumom a predajom prírodných aróm. Medzi základné produkty patria arómy z radu oxilipínov (2E)-hex-2-enal, (2E)-hex-2-enol, okt-1-én-3-ol, pent-1-én-3-ol. Pri výrobe sa spracuje ročne cca 7 500 t skorocelu (*Plantago lanceolata*) v prevádzke spoločnosti Axxence v Plavnici. Z rastlinnej biomasy sa pritom využívajú iba niektoré aromatické látky produkované enzýmovými systémami, zatiaľ čo prevaha látok, ktoré rastlina produkuje, sa externe likvidujú ako biologický odpad prevažne v bioplynovej stanici. Takýto spôsob nakladania s biomasou je pre spoločnosť ekonomicky nevýhodný. Vzhľadom na obsah celého radu biologicky účinných látok sa javí ako ekonomicky výhodnejšia alternatíva komplexného spracovania *Plantago lanceolata* izolačnými postupmi. Medzi takéto látky s vysokou pridanou hodnotou patria: fenyletanoidy, napr. verbaskozid, plantamajozid, flavonoidy, napr. apigenín, kvercetín, plantaginín, a iridoidové glukozidy, napr. katalpol a aukubín, ktorého obsah v listoch rastliny je až 2-3 % [1]. *Plantago lanceolata* má preto obrovský potenciál, ktorý determinuje jeho pozoruhodné spektrum liečebných účinkov vďaka spomínaným látkam: neuroprotektívny, protirakovinový a protinádorový, spomaľujúci starnutie, protizápalový, antibakteriálny, antivirálny, antimikrobiálny, diuretický, napomáhajúci vykašliavaniu.

Cieľom projektu bolo vyvinúť podmienky na stanovenie rastlinných extraktov pomocou HPLC-DAD s reverznou fázou C18. Rovnako boli stanovené podmienky GC analýzy [2]. Bolo potrebné vybrať najvhodnejšie rozpúšťadlá a optimalizovať spôsob (bio)separačnej metódy v laboratórnom meradle.

V ďalšej etape pristúpime k samotnej extrakcii účinných látok pomocou vhodného rozpúšťadla a ich purifikácii pomocou FPLC. Výsledkom by mal byť návrh optimálnych podmienok izolácie požadovaných látok a ich scale-up ohľadom na výrobné podmienky v prevádzke v Plavnici.

Výskum je finančne podporovaný projektom APVV-14-0538, „Komplexná izolácia látok s vysokou prídanou hodnotou zo skorocelu *Plantago lanceolata*“.

[1] European medicines agency, 22 Nov. 2011.

[2] Kubincová J., Višňovský J., Rosenberg M., Hronská H., Chochulová A., Kubinec R., Blaško J.: Journal of Food and Nutrition Research (ISSN 1336-8672) Vol. 55, 2016, No. 4, pp. (374–381).

9Po03**IDENTIFIKACE MIKROORGANISMŮ POMOCÍ MALDI-TOF VE VINOHRADNICTVÍ A VINAŘSTVÍ**

Jaromír Fiala¹, Petra Kubizniaková¹, Dagmar Matoulková¹, Jiří Sochor²

¹Výzkumný ústav pivovarský a sladařský, a.s., Lípová 15, 120 44, Praha 2

fiala@beerresearch.cz

²Ústav vinohradnictví a vinařství, Zahradnická fakulta, Mendelova univerzita v Brně, Valtická 337, 691 44, Lednice

K zachování národního kulturního dědictví v oblasti vinařské kultury a k ověření tradiční vinařské technologie byly v průběhu zpracování a produkce vína izolovány a identifikovány mikroorganismy přirozeně se vyskytující v daném prostředí. Se stále zvyšujícím se zájmem o regionální potraviny a fenomén *terroir* ve společnosti je směsné konsorcium mikroorganismů nepostradatelné pro zajištění originality a autenticity příslušného produktu - vína.

Izolace byla provedena ze zeminy v příslušné lokalitě, z listů révy vinné, z hroznů, z kalů a z moštu. Pro účely identifikace byly použity tradiční kultivační metody, biochemické testy, molekulárně-biologické metody a metoda MALDI-TOF. Byli identifikováni zástupci rodů např. *Pseudomonas*, *Cryptococcus*, *Lactobacillus*, *Rhodotorula*, *Saccharomyces*.

Tento příspěvek byl podpořen Programem aplikovaného výzkumu a vývoje národní a kulturní identity projektem DG16P02R017 "Vinohradnictví a vinařství pro zachování a obnovu kulturní identity vinařských regionů na Moravě".

9Po04**RAKYTNÍK REŠETLIAKOVÝ V NOVÝCH CEREÁLNYCH PRODUKTOCH**

Viera Jelemenská¹, Martina Benčíčová², Kristína Kukurová¹, Zuzana Ciesarová¹

¹NPPC Výskumný ústav potravinársky, Priemyselná 4, 824 75 Bratislava

ciesarova@yup.sk

²STU Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav výživy a hodnotenia potravín, Radlinského 9, 812 37 Bratislava

Rakytník rešetliakový (*Hippophae rhamnoides* L.) je z hľadiska obsahu bioaktívnych látok v plodoch a listoch veľmi cennou plodinou. Okrem tradičného spôsobu spracovania na potravinárske výrobky ako sú šťavy, sirupy, džemy a čaje, má táto plodina veľký potenciál na rozšírenie portfólia o nové druhy pečiva s rakytníkom, ktorý sa pridáva vo forme homogenizovaných plodov alebo suchých výliskov. Rakytník prináša významné obohatenie produktov o polyfenoly, karotenoidy a flavonoidy, najmä rutín a kvercetín, ktoré majú pozitívne profylaktické účinky predovšetkým na kardiovaskulárny systém a imunitu, ďalej o ω -3 a ω -6 nenasýtené mastné kyseliny, esenciálne aminokyseliny, minerály a vitamíny. Rakytník v kombinácii s pohánkovou, resp. špaldovou múkou je vhodný na prípravu jemného a trvanlivého pečiva aj zo senzorického hľadiska.

Obsah rakytníka vo forme plodov alebo suchých výliskov v jednotlivých druhoch pečiva bol optimalizovaný z technologického a senzorického aspektu. Ako najvhodnejšie sa ukázali produkty jemného pečiva (mafiny z pohánkovej, resp. špaldovej múky a koláče s mrkvou z pohánkovej, resp. špaldovej múky) s obsahom homogenizovaných plodov rakytníka 16 % a produkty trvanlivého pečiva (sušienky z pohánkovej múky) s obsahom suchých rakytníkových výliskov 5 %, resp. 12 %. Tieto výrobky mali zvýšený obsah flavonoidov, najmä rutínu v dôsledku jeho významného výskytu v pohánke a rakytníku.

Podakovanie: Príspevok vznikol v rámci projektu APVV-DS-2016-0020 „Spolupráca pri výskume a vývoji potravín obohatených rakytníkom“, ktorý podporuje MŠVVŠ SR prostredníctvom APVV v rámci výzvy Dunajská stratégia. V práci bola využitá infraštruktúra Centra excelentnosti pre kontaminujúce látky a mikroorganizmy v potravinách vybudovaného s podporou Európskeho fondu regionálneho rozvoja (ITMS 26240120042).

9Po05**BASIC TESTING THE POTENTIOMETRIC DETECTION OF ZnSO_4 -CONCENTRATION CHANGES DUE TO ITS NANOFILTRATION BY USING THE ZINC AMALGAM ELECTRODE**

Ladislav Novotný, Veronika Kočanová, Libor Dušek, Abraham Kabutey, Petr Mikulášek, Renáta Petráňková, Aneta Karásková

University of Pardubice, Faculty of Chemical Technology, Institute of Environmental and Chemical Engineering, Studentská 573, 532 10 Pardubice
nvt.l@seznam.cz

One of the well-known metallic pollutants is zinc present in its divalent ions. Recent research [1, 2] outlined a good technological applicability of nanofiltration using a pressure-driven membrane for separation of zinc (or its salts). Many experiments must be accompanied by a lot of analysis focused on determination of the input/output ratio of the analyte concentrations. The rapid, relatively simple, disposable and low-cost techniques, applicable at a place are desirable bringing reduction of a corresponding effort, time and cost expended. The aim of this work, is to present results on basic testing a potentiometric sensitivity of the zinc solid amalgam electrode ZnAE [3] with respect to concentration changes of ZnSO_4 under the conditions close to the mentioned nanofiltration technologies. In such a way the calibration E -log c dependence in a concentration range from $5 \cdot 10^{-5}$ to $1 \cdot 10^{-2}$ mol/L ZnSO_4 was obtained.

$$E = - (0.0355 \pm 0.0016) \cdot \log c - (1.4768 \pm 0.0038)$$

On the basis of known c_i (25; 50; 100; 150; 170 mg/L), the mentioned slope of E -log c and the measured differences ΔE_i corresponding to every couple of “input/output c_i/c_{out} ” samples all the potentiometrically estimated corresponding output concentrations were evaluated to be < 2 mg/L.

This work was supported by Ministry of Education, Youth and Sports No. SGS_2017_002 and by project of University of Pardubice No. SD373001/82/30352 (2016).

- [1] Cristina-Veronica Gherasim, Kristýna Hancková, Jiří Palarčík, Petr Mikulášek: J. Membr. Sci. 490, 46-56 (2015)
- [2] Cristina-Veronica Gherasim, Petr Mikulášek: Desalination 343, 67-74 (2014)
- [3] Ladislav Novotný: ChemZi, this volume (2017)

9Po06

VYBRANÉ ASPEKTY DĚJŮ SPOJENÝCH S (NANO)AGLOMERAČNÍMI, (ELEKTRO)SORPČNÍMI MEZIFÁZOVÝMI, ELEKTRODETEKČNÍMI A ELEKTROSEPARAČNÍMI PROCESY

Ladislav Novotný

Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Studentská 573, 532 10 Pardubice

nvt.l@seznam.cz

Pokroku ve výzkumu a využití uvedených procesů přispívají následující získané poznatky: V oblasti (nano)agregací jde např. o časové t a koncentrační c lineární závislosti f kvadrátu rozměru d^2 částic v jejich počáteční $d^2=f(c^2t)$ a pokročilé $d^2=f(c)$ při $[t]$ fázi (sferického) růstu.

1) U elektrosorpce byl odvozen vztah mezi pokrytím Y a koncentrací c látky typu $f_1(Y) \exp f_2(Y) = f_3(Y, c)$. Obdobné proložení lze využít i pro relativní změny d s t při aglomeraci nanočástic.

2) V některých roztocích solí bylo na polarizovaném rozhraní (např. Hg/roztok) pozorováno zvyšování mezifázového napětí γ s c . Z vypočtených změn povrchového přebytku soli $\Gamma_s = [\Gamma_s^* - (c/c_v) \cdot \Gamma_v^*] < 0$ (s povrchovou koncentrací soli Γ_s^* a vody Γ_v^*) bylo usuzováno na přítomnost změněné (resp. nové) nanostruktury vody.

3) Potenciometrie na amalgámových elektrodách byla využita při sledování postupu čištění vod pomocí měření změn potenciálu $E = E_0 + (RT/nF) \cdot \ln(a_i/a_j)$ s koncentrací interagujících složek (a_i, a_j) a za aplikace obecně využitelného modulu/interface mezi elektrodou a (i běžným) voltmetrem (obr. 1).



Obr. 1.

4) Složení, struktura a afinita povrchů elektrod vůči elektroseparatorané složce mají spolu s podmínkami depozice, kinetikou a dalšími

přítomnými složkami v roztoku významný vliv na účinnost, efektivitu a životnost technologického čištění vod elektrodopozicí kovů (složek).

Tato práce vznikla s podporou projektu Univerzity Pardubice č. SD373001/82/30352 (2016).

[1] Ladislav Novotný: DrSc.-dizertace, AV ČR, Praha, 1998

9Po07

TESTY EKOTOXICITY VYBRANÝCH MIKROPOLUTANTŮ

Jiří Palarčík, Petra Bencová, Zuzana Blažková, Vojtěch Trousil

Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Studentská 573, Pardubice 532 10

Nežádoucí antropogenní vliv na životní prostředí se projevuje také přítomností tzv. mikropolutantů, jejich koncentrace se pohybují řádově v ng/l – µg/l. Mezi ně patří také léčiva, na které je tato zaměřena práce. Testovanými léčivy byly diklofenak, naproxen, kofein a kyselina klofibrová. Uvedená léčiva se vyskytují převážně ve vodní složce životního prostředí, proto byly použity testy ekotoxicity na vodních organismech [1, 2]. Testovanými organismy byly *Pseudomonas putida*, *Parachlorella kessleri*, *Sinapis alba* a *Lemna minor*. Na základě testů byly vyhodnoceny účinky těchto léčiv a byla posouzena jejich ekotoxicita. Jako nejtoxičtější bylo ve všech testech vyhodnoceno léčivo diklofenak. Nejnižší efekt byl pozorován u kofeinu a naproxenu. Dále byl v rámci experimentů sledován synergický efekt směsí testovaných léčiv, který však nebyl prokázán.

Tento projekt byl realizován za finanční podpory projektů SGS_2017_002 a SGS_2017_004.

[1] TERNES, Thomas A. a Adriano JOSS . *Human pharmaceuticals, hormones and fragrances: The challenge for urban water management*. London: IWA Publishnig, 2006, 455 s. ISBN 9781843390930.

[2] SANTOS, Lúcia H.M.L.M., A.N. ARAÚJO, A. FACHINI, A. PENA, C. DELERUE-MATOS a M.C.B.S.M. MONTENEGRO. Ecotoxicological aspects related to the presence of pharmaceuticals in the aquatic environment. *Journal of Hazardous Materials*. 2010, **175**(1-3), s. 45-95. ISSN 03043894.

9Po08

POROVNÁNÍ KJELDAHLOVY A DUMASOVY METODY PRO STANOVENÍ OBSAHU N-LÁTEK V OBILOVINÁCH

Zuzana Pálková¹, Marcela Vaníčková¹

¹Český metrologický institut, Okružní 31, 638 00 Brno,
OI Pardubice
zpalkova@cmi.cz

Pro stanovení obsahu dusíku a dusíkatých látek v obilovinách je nejrozšířenější referenční metoda dle Kjeldahla [1]. Náročná časová závislost a nezanedbatelná ekologická zátěž (toxické chemikálie, korozivní páry) patří mezi velké zápory této metody. Kjeldahlovou metodou lze stanovit pouze organický dusík a amoniak.

Naproti tomu metoda dle Dumase [2, 3] je jak časově, tak i ekologicky mnohem výhodnější. Je možné analyzovat mnoho vzorků v jedné analýze bez užití chemikálií. Metodou spalování lze stanovit jak dusík organický, tak i anorganický. Proto tato metoda poskytuje výsledky mírně vyšší než metoda dle Kjeldahla.

Obě metody spojuje nutnost přepočítávat naměřené hodnoty pomocí korekčních faktorů, jelikož ani jedna z metod nestanovuje reálný protein. U metody dle Kjeldahla [1] jsou faktory dány normou (6,25 pro pšenici a 5,7 pro ječmen). Pro metodu dle Dumase [2] sice norma také zmiňuje faktory, ale s odkazem na publikace se čísla liší (5,83 a 5,61 pro pšenici a 5,68 a 5,83 pro ječmen).

V naší laboratoři bylo provedeno stanovení obsahu dusíkatých látek oběma jmenovanými metodami na reálných vzorcích pšenice a ječmene na přístrojích Kjeltex Analyzer KA1030 a Primacs SN100. Porovnáním hodnot byl učiněn pokus o validaci vhodného přepočítavacího faktoru pro metodu dle Dumase.

Práce vznikla za podpory projektu ČMI 17501101.

- [1] ČSN EN ISO 20483:2006 Obiloviny a luštěniny – Stanovení obsahu dusíku a výpočet dusíkatých látek – Kjeldahlova metoda
- [2] ČSN EN ISO 16634-1 Potraviny – Stanovení obsahu celkového dusíku spalováním podle Dumasovy metody a výpočet obsahu hrubého proteinu – Část 1: Olejnin a krmiva
- [3] ČSN EN ISO 16634-2 Potraviny – Stanovení obsahu celkového dusíku spalováním podle Dumasovy metody a výpočet obsahu hrubého proteinu – Část 2: Obiloviny, luštěniny a mlýnské výrobky

9Po09

OBSAH MINERÁLNÍCH LÁTEK V PRODUKTECH Z RAKYTNÍKU ŘEŠETLÁKOVÉHO

Revenco D¹, Cejpek K¹, Koplík R¹.

¹Ústav analýzy potravin a výživy, VŠCHT Praha
revencoi@vscht.cz

Rakytník řešetlákový je rostlina, z čeledi hlošovitých, tvořící keře s oranžovými plody, které obsahují karotenoidy a jsou také dobrým zdrojem bioaktivních látek: volných aminokyselin, nenasycených mastných kyselin, vitaminů C a E, bioflavonoidů a minerálních látek. Kvůli svému složení je hojně používán v kosmetickém a v potravinářském průmyslu. V potravinářství se používá pro výrobu džemů, džusů, čajů, olejů a doplňků stravy.

Cílem této práce bylo monitorovat obsah minerálních látek v plodech rakytníku, šťávě a rakytňkové mouce. Pro zjištění obsahu minerálních látek byly použity techniky atomové absorpční spektrometrie pro analýzu Na, Mg, K, Ca a hmotností spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem pro stanovení stopových esenciálních prvků Cu, Co, Fe, Mo, Mn, Se, Zn a toxických prvků As, Cd, Pb a U.

Poděkování: Příspěvek vznikl v rámci projektu DS-2016-0020 „Cooperation in research and development of sea buckthorn enriched foods“, který finančně podporuje MŠMT ČR pod CZ ID 8X17020 v rámci Programu pro financování projektů mnohostranné vědeckotechnické spolupráce v Podunajském regionu.

9Po10

STUDIUM HYDROXYSKOŘICOVÝCH KYSELIN U MOŠTU A VÍNA KVAŠENÉHO AUTOCHTONNÍMI KVASINKAMI POMOCÍ HPLC-UV/VIS

Jiri Sochor¹, Lenka Sochorova¹, Mojmir Baron¹,
Jaromir Fiala²

¹Ústav vinohradnictví a vinařství, Zahradnická
fakulta, Mendelova Univerzita v Brně, Valtická 337,
691 44, Lednice, jiri.sochor@mendelu.cz

²Výzkumný ústav pivovarský a sladařský, a.s., Lípová
15, 120 44, Praha 2

S rozmachem fenoménu terroir ve vinohradnictví a vinařství, respektive ve společnosti obecně, se namísto průmyslové uniformity dostává do popředí zájem o původ, originalitu a autenticitu produktu (což dokládá rostoucí zájem o vína VOC v Česku). Tento proces je logicky doprovázen rozvojem lokální i regionální identity

nejen samotných vinohradníků a vinařů, nýbrž celých komunit vinařských obcí.

Koncentraci hydroxyskořicových kyselin ve víně ovlivňují především pěstitelské a klimatické podmínky, zralost v době sklizně a odrůda. Rozdílné koncentrace těchto sloučenin také závisí na typu vyrobeného vína. Naše studie je zaměřena na analýzu vybraných hydroxyskořicových kyselin u odrůdy Chardonnay, která byla kvašena autochtonními kvasinkami z Moravské vinařské oblasti. Pomocí vysoko-účinné kapalinové chromatografie s UV-VIS detekcí byl u vína sledován obsah kyseliny koutarové, kaftarové, fertarové a 2-S-glutathionyl kaftarové. Tyto sloučeniny byly analyzovány v průběhu výroby vína, a to od moštu až po hotový produkt – víno.

Tento příspěvek byl podpořen Programem aplikovaného výzkumu a vývoje národní a kulturní identity projektem DG16P02R017 „Vinohradnictví a vinařství pro zachování a obnovu kulturní identity vinařských regionů na Moravě“.

9Po11

STANOVENÍ TERPENICKÝCH LÁTEK U VÍNA KVAŠENÉHO PŮVODNÍMI DRUHY KVASINEK

Lenka Sochorová¹, Mojmir Baron¹, Michal Kumsta¹, Jiri Sochor¹

¹Ústav vinohradnictví a vinařství, Zahradnická fakulta, Mendelova Univerzita v Brně, Valtická 337, 691 44, Lednice
tomaskova.l.9@gmail.com

V hroznech a víně révy vinné jsou důležitými aromatickými látkami terpeny, norisoprenoidy, methoxypyraziny, těkavé fenoly a vonné thioly. Tyto látky přispívají k vytvoření charakteristického stylu vína, ze kterého můžeme odvodit, odkud víno pochází, z jaké je odrůdy, jak bylo vyrobeno a jak je staré.

Pro experiment byla vybrána aromatická odrůda Pálava, která byla kvašena původními druhy kvasinek z Moravské vinařské oblasti. Pomocí plynové chromatografie s hmotnostní detekcí (GC-MS) byly stanoveny vybrané terpenické látky. Pozornost byla zaměřena na linalool, nerol a geraniol. Koncentrace jednotlivých volatilních látek ve víně byla stanovena za pomoci extrakce methyl-t-butyletherem.

Tento příspěvek byl podpořen Programem aplikovaného výzkumu a vývoje národní a kulturní identity projektem DG16P02R017 „Vinohradnictví a vinařství pro zachování a obnovu kulturní identity vinařských regionů na Moravě“.

9Po12

REMOVAL OF NONSTEROIDAL ANTI-INFLAMMATORY DRUGS BY HETEROGENEOUS PHOTOCATALYSIS

Vojtěch Trousil¹, Zuzana Blažková¹, Oldřich Machalický², Jiří Palarčík¹, Jiří Cakl¹

¹Institute of Environmental and Chemical Engineering, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Czech Republic, vojtech.trousil@upce.cz

²Institute of organic chemistry and technology, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Czech Republic

Pharmaceutical residues are special type of water pollutants. Its amount in waters is relatively low, but thanks to special chemical and biological properties there is a risk of chronic toxicity even at concentration range of ng/L. Heterogeneous photocatalysis is a system, which consists of UV radiation, catalyst and oxidant. After irradiation of the catalyst surface, hydroxyl radicals occur and cause oxidation of the pollutants [1, 2].

This work is focused on optimization of the process of heterogeneous photocatalysis (amount and type of catalyst, type of oxidant, pH value) of two common nonsteroidal anti-inflammatory drugs diclofenac and naproxen (500 µg/L) in tap water. Optimized conditions (0,5 g/L of TiO₂ AV-01, O₂ or H₂O₂ as oxidant) were used on real water matrices, where pharmaceuticals were spiked. Non-specific manner of hydroxyl radicals was confirmed. Lower conversions of pharmaceuticals occurred because of higher amount of organic substances (measured as COD) in real water matrices. Nevertheless, after acidification and hydrogen peroxide addition removal rate increased significantly.

This work was supported by Ministry of education, Youth and Sports (SGS_2017_002).

- [1] Damia Barceló, Mira Petrovic: Emerging contaminants from industrial and municipal waste: Occurrence, analysis and effects, (2008)
- [2] Damia Barceló, Mira Petrovic: Emerging contaminants from industrial and municipal waste: Removal Technologies, (2008)

9Po13**CADMIUM DISTRIBUTION IN MAIZE PLANTS**

Zuzana Vatehová¹, Anna Malovíková¹, Karin Kollárová¹, Desana Lišková¹

¹ *Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovakia
zuzana.vatehova@savba.sk*

Cadmium, a dangerous pollutant for plants as well as animals, is a divalent cation with a high affinity to bind to the molecules with acidic sites. The plants have evolved various defence mechanisms against toxic ions. The first barrier is the cell wall and comprises: carboxyl groups of galacturonic and glucuronic acids, the oxygen atoms of the hydroxyl groups, the ring oxygen atoms and the bridging oxygen atoms of the monosaccharide units [1]. The second barrier is composed of specific cytoplasmatic molecules (metallothioneins, glutathiones and phytochelatins) with sulphanyl groups [2]. The aim of our work was to determine the total cadmium content in whole maize plants as well

as on the cellular level. Approximately 90% of the accumulated cadmium in plants is in the roots, and 86.4% of that is in the root cell walls. The main place of these cations binding is hemicelluloses (77.3%), which represents 59.7% of total accumulated cadmium content. In shoots, was the highest content of cadmium is also in the cell walls (59.3%). The main binding place of these cations is cellulose in shoot cell walls (52.4%). The defence mechanism of root and shoot cell walls is different and depends on the composition of the cell walls.

This work was supported by VEGA no. 2/0083/14.

- [1] Vatehova Z., Malovikova A., Kollarova K., Kucerova D., Liskova, D. 2016. Plant Physiol. Bioch. 108, 90-98.
- [2] Pal M., Horvat E., Janda T., Paldi E., Szalai G. 2005. Physiol. Plant. 125, 356-364.

**POSTERY - SEKCIA 10
CHEMPROGRESS - CHEMICKÉ
TECHNOLÓGIE**
10Po01**PROCESY ČISTĚNÍ HÉLIA PRO ÚČELY CHLAZENÍ REAKTORŮ ČTVRTÉ GENERACE**

Jozef Dámer¹, Jan Berka¹, Jan Vít¹

¹ *Centrum výzkumu Řež s.r.o., Hlavní 130, 250 68 Husinec-Řež, Česká republika
jozef.damer@cvrez.cz*

V rámci medzinárodného výskumu zameraného na pokročilé plynom chladené jadrové reaktory (označované ako HTGR, V/HTR a GFR) sa výskumné organizácie v spolupráci s priemyselnými partnermi v ČR venujú problematike čistenia plynného chladiča primárneho okruhu týchto reaktorov. Ako chladič primárneho okruhu je pre tieto typy reaktorov uvažované chemicky inertné hélium, ktoré však obsahuje stopové koncentrácie plynných prímiesí, typicky CO, CO₂, CH₄, H₂, H₂O. Tieto prímiesi môžu spôsobovať za

vysokých teplôt koróziu vnútorných povrchov okruhu, je preto potrebné počas chodu reaktoru tieto nečistoty z chladiča priebežne odstraňovať. Pre separáciu uvedených zmesí sa z pravidla používa kombinácia procesov založených na adsorpcii, katalytickej oxidácii a nízkoteplotnej adsorpcii. V rámci výskumného programu bola testovaná separácia uvedených látok s využitím na trhu dostupných adsorbentov na báze zeolitu, aktívneho uhlia a CuO. Experimenty ktorých cieľom bolo určenie kapacít testovaných materiálov a účinnosti separácie boli vykonané laboratórnych experimentálnych zariadeniach, kombinovaný proces separácie plynných prímiesí bol následne overovaný na poloprevádzkovom zariadení – okruh čistenia héliu zariadenia HTHL, ktorého dizajn vychádza z reálneho okruhu čistenia chladiča primárneho okruhu reaktoru typu HTR. Vybrané výsledky tohto výskumu sú prezentované týmto posterom.

Predložená práca vznikla vďaka projektom podporovaným TAČR: TA03020850 a TH02020578.

10Po02**UTILISATION OF CRUDE GLYCEROL FOR PREPARATION OF GLYCEROL CARBONATE**

Alexander Kaszonyi, Martin Zsigo, Livia Lepesova, Magdaléna Štolcova

*Faculty of Chemical and Food Technology,
Department of Organic Technology, Catalysis and
Petroleum Chemistry, Bratislava, Slovak Republic*

The growing production of biodiesel(FAME) has generated a surplus of glycerol, because the formation of FAME is accompanied by 10% w/w glycerol as a co-product. Glycerol carbonate(GC) prepared from bioglycerol is interesting for its chemical and physical properties which allow employing GC as non-volatile organic solvent at manufacturing of cosmetics, medicines, coating materials, electrolytes for Li-ion batteries, polycarbonates and other useful materials. The main methods for the preparation of GC from glycerol involve the reaction with a source of C=O group: (a) phosgene, (b) dialkyl carbonate or alkylene carbonate, (c) carbon monoxide and oxygen or carbon dioxide, (d) urea. The preparation of glycerol carbonate from relatively cheap urea and bioglycerol can be a green technology, because the byproduct of reaction, NH₃, can be recycled to the production of urea or N-containing fertilizer. By reaction of glycerol and urea under lowered pressure at mild temperatures - as in our study - can be reached yields and selectivity of glycerol carbonate above 80 % and 90 %, respectively. Zn(II) based catalysts seem to be the best choice for this process [1-3].

The aim of this work was to investigate the key reaction steps and the effects of reaction conditions on the synthesis of glycerol carbonate from bioglycerol and urea. Another aim was to study the possibility of using crude glycerol prepared directly from the byproduct of FAME production plant by simplified and more economic purification method. It was found that the increased temperature and lowered pressure in the case of both, catalyzed and uncatalyzed reaction have significant influence on the decomposition of urea to HNCO and ammonia, which is a key initial step of glycerol carbonate formation. The reaction of HNCO with glycerol to 2,3-dihydroxypropylcarbamate is practically immediate. Lowered pressure removes NH₃ from the reaction mixture and hinders its reversible reaction with HNCO. ZnO and ZnSO₄ can help with stabilization of HNCO and increase the rate of its reaction with glycerol. The lowered

pressure is important also during next key reaction step, cyclization of intermediate 2,3-dihydroxypropylcarbamate to glycerol carbonate. H₂SO₄ was used in order to stabilize the emergent product. With purified glycerol from FAME production have reached comparable results as with pure glycerol. This can be important in order to decrease the price of the final product.

Acknowledgements: This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-0133-11 and made in the joint Sk-Hu lab supported by ERDF under the contract No. HUSK/1101/1.2.1/0318.

- [1] J.W. Yoo, Z. Mouloungui, A. Gaset, FR 9800451, 1998., [15] Z. Mouloungui, J.-W. Yoo, C. L. Gachen, A. Gaset, EP0739888, 1996.
- [2] Fujita, S. Yamanishi, Y. Arai, M. Journal of Catalysis 297, 2013, 137–141
- [3] Wang, D., Zhang, X., Liu, C. Tingting, C. React. Kinet. Mech. Catal. 115, 2015, 597-609

10Po03**VLIV TYPU NOSIČE NA IMOBILIZACI RU KATALYZÁTORU PRO HYDROGENACI BUTYLSORBÁTU**

Maria Kotova, Klaudia Kollárová, Eliška Vyskočilová, Libor Červený

*Ustav organické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 116 28 Praha 6
Maria.Kotova@vscht.cz*

Listové alkoholy, *cis*-hex-3-en-1-ol a *trans*-hex-2-en-1-ol, jsou sloučeniny hojně používané v parfumářském průmyslu. Jejich vonné vlastnosti jsou dány přítomností dvojné vazby v molekule. Geometrická izomerie přesně udává senzorké vlastnosti látek [1].

Syntézy listových alkoholů jsou vzhledem k požadované stereospecifitě náročné, několikastupňové procesy s nízkými výtěžky. V poslední době bylo prokázáno, že hydrogenaci butylsorbátu je možné získat prekurzor pro přípravu jednoho z listových alkoholů – *cis*-hex-3-en-1-olu. Jako katalyzátor byl používán rutheniový komplex [Cp*Ru(butylsorbát)]Tf [2]. Tato práce byla zaměřena na přípravu tohoto komplexu a jeho imobilizaci na různé smektitové minerály (hektorit, montmorillonit, bentonit) pomocí iontové výměny. Byla sledována závislost imobilizovaného množství komplexu na typu nosiče a jeho úpravě. Jako nejlepší nosič se ukázal montmorillonit. Při jeho použití bylo zachyceno 92 hm. % komplexu (15 mg / 250 mg nosiče). Dále byl sledován vliv teploty kalcinace nosiče na účinnost imobilizace katalyzátoru. Jako nejvhodnější teplota se ukázala 200 °C. Dalším

cílem práce byla hydrogenace butylsorbátu v heterogenním uspořádání a sledování vlivu typu nosiče na aktivitu a selektivitu katalyzátoru. Hydrogenace byla provedena za teploty 50 °C, tlaku 4 MPa. Nejlepších výsledků bylo dosaženo s použitím rutheniového komplexu imobilizovaného na montmorillonit. Selektivita na žádaný butyl-*cis*-hex-3-enoát činila po 1 hodině 98 % při konverzi butylsorbátu 80%.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č. 20-SVV/2017).

- [1] Červený L., Kluson P., Kukula P.: Chem. Listy, 91, 342 (1997).
- [2] Kotova M., Vyskočilová E., Červený L.: Catalysis letters, DOI: 10.1007/s10562-017-2084-7 (2017).

10Po04

LIGNÍN AKO ZLOŽKA FENOLFORMALDEHYDOVÝCH ŽIVÍC

Michal Procházka¹, Zuzana Nógellová¹, Jakub Paluš¹,
Lýdia Majerčíková², Dušan Velič³

¹Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 845 41
Bratislava, Slovensko

michal.prochazka@savba.sk

²ENERGOCHEMICA TRADING a. s., Priemyselná
720, 072 22 Strážske, Slovensko

³Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 841 04
Bratislava, Slovensko

Lignín je po celulóze druhou najrozšírenejšou prírodnou látkou na svete a často je označovaný ako „odpadný materiál“. Celosvetovo sa priemyselná produkcia lignínu pohybuje na úrovni 5 miliónov ton a väčšinou sa využíva ako palivo [1]. Lignín je prírodný aromatický polymér, ktorý tvorí základnú zložku dreva, kôry stromov a je súčasťou rastlinného tela. V dreve sa jeho obsah pohybuje na úrovni 19 – 30 %, v prípade biomasy je to 8 – 22 %. Lignín je tvorený zložitými fenolovými heteropolymérmi. Jeho polymérny reťazec obsahuje až 10 000 jednotiek. Tieto polymérne reťazce môžu byť fragmentované rôznymi chemickými cestami.

Využite lignínu vo výrobe fenol-formaldehydových živíc je postavené na báze substitúcie určitého presne definovaného množstva fenolu chemicky príbuzným lignínom, bez pozorovateľných kvalitatívnych zmien výsledného produktu. Na výsledné vlastnosti fenolformaldehydových živíc majú vplyv rôzne parametre, ako je fragmentácia lignínu, spracovanie lignínu, pomery aditív a iné. Vlastnosti výsledných preglejovaných dosiek závisia nielen od použitých živíc, ale aj spôsobu lepenia.

Mechanické vlastnosti preglejovaných dosiek pripravených v prevádzkovom pokuse použitím živíc s 50 %-nou náhradou fenolu lignínom boli testované podľa noriem STN EN 314-1 a STN EN 314-2. Preglejované dosky sa líšili nánosom lepidlovej zmesi, ako aj dobou lisovania a cieľovou hrúbkou dosiek. Z meraní mechanických vlastností boli stanovené šmykové pevnosti preglejok v rozmedzí od 0,65 MPa do 1,2 MPa a priemerné porušenie v drevných vláknach od 40 % do 80% plochy zlomu.

Táto práca bola podporovaná projektami APVV-14-0120 a APVV-15-0201.

- [1] A. Vishtal, A. Kraslawski, Challenges in industrial applications of technical lignins, Bioresources. 6 (2011) 3547–3568.

10Po05

EFFECT OF VARIOUS ORGANIC COMPOUNDS ADDITION ON THE SYNTHESIS OF NANOSTRUCTURED CU- FE-P-O CATALYSTS FOR BIOGAS SELECTIVE OXIDATION TO FORMALDEHYDE AND METHANOL

Veronika Hergelová, Magdaléna Štolcová, Alexander Kaszonyi

Department of organic Technology, Catalysis and
Petrochemistry, Slovak University of Technology in
Bratislava, Radlinského 9, 812 15 Bratislava, Slovak
Republic
magdalena.stolcova@stuba.sk

In recent years, nanostructured materials have considerable interest in various fields due to their excellent physical and chemical properties which are significantly different from those of bulk counterparts. Complex processes, expensive precursors and low production rates are the major drawbacks of several of preparation techniques. To solve most of those shortcomings, a method using addition of various types of small molecular weight organic compounds directly to the reaction mixture had been utilized. Such a one-step synthesis is well suited for the preparation of nanocomposite mixed oxides. Compared with the other techniques, the process is of interest due to overall easy, lower cost and less energy-intensive steps.

Biogas as a mixture of methane and carbon dioxide is formed by the anaerobic decomposition of putrescible organic materials. Both methane and carbon dioxide are greenhouse gases which resulting in climate changes. Many researchers are addressing works on recycling the greenhouse gases. One option is direct

conversion of methane into value added products such as formaldehyde and methanol.

In this work, copper iron pyrophosphate nanomaterials were synthesized using various low molecular weight organic additives. The effect of the structural changes on the catalytic performances for methane partial oxidation to formaldehyde and methanol was studied.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-0133-11 and by ERDF project No. HUSK/1101/1.2.1/0318.

10Po06

ŘÍZENÍ KONCENTRACE KYSLÍKU VE SLITINĚ PBBI METODOU ZMĚNY SLOŽENÍ KRYCÍHO PLYNU

Jan Vít¹, Michal Kordač¹, Lucia Rozumová¹

Centrum výzkumu Řež s.r.o., Hlavní 130, 250 68 Husinec-Řež

jan.vit@cvrez.cz

Chladivo PbBi je klíčovou složkou konceptu reaktoru chlazeného tekutým těžkými kovem IV. generace. Studium chemické interakce PbBi s kovovými materiály okruhu reaktoru je důležitou oblastí ve vývoji reaktoru s tímto chladičem. Chladivo dosahuje v reaktoru teplot vyšších než 500 °C a je klíčové zajistit ochranu před korozi i při těchto podmínkách. Tato ochrana ocelových částí proti korozi je založena na udržování oxidových vrstev na povrchu těchto částí. Složení a stabilita těchto vrstev je velmi citlivá na

koncentraci přítomného kyslíku - při vysoké koncentraci dochází k oxidaci chladiva; při příliš nízké koncentraci není vrstva oxidů stabilní.

Změny koncentrace kyslíku v systému je možné realizovat různými způsoby, v této studii byla použita metoda dávkování plynů s různým obsahem kyslíku do krycího plynu nad hladinou slitiny PbBi. Cílem této práce bylo ověřit použitelnost této metody i pro malé systémy laboratorní velikosti a zvládnutí automatické kontroly koncentrace kyslíku zpětnou vazbou z dat naměřených senzorem koncentrace kyslíku přímo ve slitině.

Vzhledem k velmi nízkým rovnovážným parciálním tlakům kyslíku i jejich potřebným změnám na udržení požadované koncentrace bylo nezbytné vyvinout systém umožňující regulaci v těchto atypických podmínkách. Výsledný systém prokázal za laboratorních podmínek svoji funkčnost i při velmi pomalé dynamice statického systému slitina PbBi - krycí plyn.

Práce probíhala v rámci projektu GAČR-KAMILE c.n. 16-15008S. Prezentované výsledky byly finančně podpořeny Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy - projekt LQ1603 Výzkum pro SUSEN. Práce byla realizována na velké infrastruktuře Udržitelná energetika (SUSEN) vybudované v rámci projektu CZ.1.05/2.1.00/03.0108.

AUTORSKÝ INDEX

A

Adámek K.	197
Achelle S.	173, 186
Aisawa S.	106
Almáši M.	97
An C.	94
Ariga K.	102
Arion B. V.	148, 149
Ausekar M.	137

B

Babíková M.	70
Babuka D.	190
Bača L.	160
Bakoš D.	131
Baluchová S.	73
Balzerová A.	86, 87
Baran P.	68
Baran R.	186
Baráth M.	99, 173
Baráth P.	134
Barek J.	132
Baron M.	205, 206
Bartoň D.	201
Bartůňek V.	116
Baťová J.	106
Baumgarten M.	94
Bavol D.	132
Bednářová K.	138
Beinhrohr E.	77
Bella M.	183
Bellová R.	72
Bencová P.	204
Benčíčová M.	124, 125, 203
Bendakovská L.	77
Benkocká M.	155
Benková Z.	110
Benson V.	73
Berka J.	207
Berkeš D.	99, 100, 166, 169
Bessada C.	164
Běťák J.	106
Biedermann D.	150
Biely P.	99
Bilka S.	167

Bílková Z.	136
Billon L.	194
Bláhová L.	159
Blažková Z.	201, 204, 206
Blood K.	96
Boča M.	95, 96, 163
Bodík I.	121
Bodík M.	88
Body P.	123
Bogdanová K.	87
Borisov O.	194
Bouzek K.	66, 129
Breza M.	148
Brezová V.	149
Brož B.	197
Brožek V.	161, 162
Brůčková L.	171
Bučinský L.	148
Buffa R.	195
Bugar I.	194
Bugárová N.	88
Burčová Z.	124, 126, 127
Bureš F.	167, 170, 173, 177, 182
Buzek J.	95

C

Cakl J.	201, 206
Capáková Z.	93
Capek I.	154
Capek P.	154, 196
Cejpek K.	120, 123, 205
Ceznerová E.	174
Cibulka R.	201
Cibulková Z.	78, 79, 152
Ciesarová Z.	124, 125, 203
Cifra P.	110
Cigl M.	76
Cik G.	194
Crivelli M. S.	169
Csomorová K.	107, 189
Culková E.	72
Cvačka J.	135

Č

Čaplovič J.	119
Čársky J.	126

Čecháková L.	134
Čeppan M.	131
Černoch P.	111
Černý V.	195
Červenák J.	112
Červený L.	208
Česlová L.	136
Číková E.	93
Čížek A.	169
Čtrnáctová H.	117

D

Dámer J.	207
Damonte E. B.	196
Daňhel A.	75, 138, 144
Danielik V.	129, 130
Danko M.	110
Danková M.	70
Darvasiová D.	148
Daško Ľ.	125
Dejmková H.	132, 139
Deniau E.	194
Distler P.	113
Dittert I.	73
Diver R.	96
Divis D.	165
Doháňošová J.	168, 187
Donovalová J.	103
Doušová B.	159
Drabina P.	101, 171, 185
Dubaj T.	78, 79, 152
Duchková E.	159
Dulanská S.	113, 114
Ďurkáčová S.	110
Dusza J.	164
Dušek L.	121, 203
Dvurečenskij A.	154
Dyr E. J.	174
Dytrtová J. J.	83

F

Fabián M.	122
Fabrik I.	134
Fargašová A.	86, 87
Fečková A.	192
Fellner P.	129
Feranc J.	160
Feriancová L.	168, 172
Ferko B.	166, 169
Fiala J.	202, 205

Fiedlerová A.	189
Filip J.	83
Fischer R.	176
Florian P.	164
Fojta M.	75
Formánková K.	123
Francová P.	105, 153, 190
Franová P.	156

G

Galamboš M.	160, 165
Galanda D.	114, 115
Gallo J.	87, 92
Ganajová M.	117
Gáplovský A.	103, 183
Gemeiner P.	193
Gojda J.	139
Goljer I.	69
Goněc T.	169
Grabarczyk M.	142
Gracza T.	168, 176
Greif G.	123
Greifová M.	123
Gurska S.	89
Gyepes R.	97

H

Hajdúch M.	184
Hajdúchová Z.	160
Haladjova E.	104
Halko R.	143
Hallon Ľ.	120
Haluzík M.	141
Hamplová V.	76
Hanusek J.	102, 170
Havel J.	137, 140, 141
Havelek R.	165, 180
Havran L.	75
Ház A.	127
Hegedúsová L.	148
Hegrová M.	144
Heizer T.	105, 190
Henke P.	153
Hergelová V.	209
Hermann P.	143
Hermanová M.	75
Hermanová S.	111
Hill P. J.	102, 177
Hirahara H.	106, 193
Hirsch J.	99, 173

Híveš J.	130
Hladíková V.	170
Hlídková H.	191
Hloušková Z.	154, 167, 170
Hoecherl A.	192
Hochvaldová L.	89, 91
Hološ A.	155
Honzíček J.	165, 188
Hood-Nowotny R.	165
Horák D.	156
Horáková E.	171
Horná D.	123
Horníček J.	161
Horváth M.	103
Horváthová B.	113
Horváthová J.	124, 125
Hovancová J.	86, 133
Hradilová Š.	89, 92
Hrčková L.	189
Hrdá K.	142
Hricko J.	133
Hricovíni M.	149, 172
Hricoviniová Z.	172
Hronkovic J.	193
Hrouzková S.	136
Hrubý M.	85, 89, 104, 105, 109, 111, 156, 184, 190, 191, 192, 194
Humpolíček P.	191
Hybenová E.	125

Ch

Chmelař J.	84
Chodák I.	108, 111, 196
Chocholouš P.	145
Chochulová A.	202
Chvátíl D.	198
Chýlková J.	73, 74

I

Iakovleva A.	95
Illová R. D.	107
Imramovský A.	178
Ivančo J.	155
Ivanič F.	108
Izakovič M.	98

J

Jablonský M.	127
Jaček M.	139

Jahn U.	174
Jakl M.	83
Jakubčinová J.	173
Jakubec I.	197
Jakubec P.	99
Jampílek J.	169
Jancura D.	122
Jančovičová V.	131
Jane E.	194
Janek M.	160
Janigová I.	111, 189
Janíková L.	73, 74
Jankovič L.	111
Jankovský O.	116
Janoušková O.	109, 192
Jelemenská V.	124, 125, 203
Jerigová M.	148
Jiráček D.	190
John J.	113
Jurišová J.	129

K

Kabutey A.	203
Kalenda P.	188
Kaman O.	88
Kammel R.	102
Kaprálková L.	107
Karásková A.	203
Kaszonyi A.	208, 209
Kašička V.	83
Kašpar M.	76
Kelnar I.	107
Kerekeš K.	130
Kinart Z.	84
Kis P.	122
Kissinger P. T.	96
Kleinová A.	107, 192
Klepárník K.	78
Kletetschka G.	199
Klikar M.	167, 173
Klychnikov M.	174
Kmentová I.	172
Knapová T.	155
Knotková K.	106
Kočanová V.	203
Kohout M.	76, 103
Koktan J.	88
Kolář M.	87, 92
Kolařík J.	83
Kolářová K.	155
Kolářová L.	140
Kolářová V.	105, 190, 192

Kollár J.....	155, 189
Kollárová K.....	207, 208
Kolouchová K.....	104, 190
Koloušek D.....	159
Kolská Z.....	155, 156
Komadel P.....	94
Kománková L.....	104, 191
Konarecká M.....	88
Konečná k.....	187
Konefal R.....	192
Kontrík M.....	164
Koóš M.....	183
Koóš P.....	176
Kopčová K.....	122
Koplik R.....	205
Kopuncová M.....	124, 125
Korbecka I.....	76
Kordač M.....	210
Kormanec J.....	146
Kos J.....	169
Kosina P.....	150
Kostiv U.....	156
Kotek J.....	190
Kotlín R.....	174
Kotora M.....	181
Kotova M.....	208
Kováčová M.....	107, 191, 192
Kozák J.....	196
Kozakovičová J.....	107
Kozempel J.....	89
Kozics K.....	172
Králik M.....	129
Králová O. Z.....	87, 90
Královec K.....	180
Krasňan V.....	69
Krátký M.....	175, 187
Krausová I.....	198
Krejčová A.....	77, 142
Kreps F.....	124, 126, 127
Kriegerová K.....	143
Křištofiková D.....	175
Krivosudský L.....	160
Kříž M.....	71
Kroliak M.....	77
Kronek J.....	104, 111
Kroneková Z.....	104
Krůšek J.....	73
Křenková K.....	141
Kubát P.....	153, 191
Kubíková B.....	96, 163
Kubiňáková E.....	130
Kubincová J.....	202
Kubizniaková P.....	202

Kučka J.....	104, 105, 156, 184, 190, 192
Kuchtanin V.....	98
Kukleva E.....	89
Kukurová K.....	124, 125, 203
Kuliček J.....	193
Kulichová K.....	147
Kumsta M.....	206
Kundrát O.....	201
Kupčík R.....	136
Kupková M.....	90
Kuruc J.....	115, 116
Kvítek L.....	89, 91, 92

L

Labuta J.....	102
Lakyová L.....	87
Lapčík L.....	93
Larson C.....	96
Lásiková A.....	168
Laudová B.....	156
Lebeda O.....	112
Lehocký M.....	191
Leonard N.....	96
Lexová T.....	77
Lhotka M.....	159, 161, 162
Ligmajer F.....	138, 144
Lipenská K.....	84
Lišková D.....	207
Litecká M.....	97
Liworová V.....	161, 162
Lobaz V.....	89, 104, 156
Loghina L.....	95, 158
Lopatka P.....	176
Lorenc D.....	80, 150
Loukotová L.....	104, 105, 190, 192
Loužil J.....	174
Lozano M.....	139
Lubal P.....	143
Luk B. S.....	189
Lukáčová Ch. Z.....	72

M

Mackuľák T.....	121
Machalický O.....	206
Machálková A.....	165
Majerčíková L.....	209
Makowska H.....	94
Malatinský T.....	176
Maliarová M.....	147
Mališ J.....	129

Malovíková A.....	207
Manová A.....	77
Marek A.....	197, 198
Marek I.....	162
Marchalín Š.....	146
Markošová K.....	69
Marković Z.....	85, 191
Markovič M.....	176
Markus J.....	100
Marszalek T.....	94
Martinková P.....	73
Masárová P.....	98
Mastihuba V.....	122
Mastihubová M.....	122
Mastný L.....	161, 162
Mastný M.....	201
Matějka L.....	112
Matějková J.....	85
Mátel L.....	113, 114
Matoulková D.....	202
Matsushita.....	102
Matulová M.....	134, 146
Mawale R.....	137, 140, 141
Mazúr M.....	82, 98, 149
Mečiarová M.....	175, 179
Medřický J.....	162
Melicherčíková D.....	72
Melounková L.....	165
Melus P.....	193
Mičušík M.....	88, 93, 107, 193
Michnová.....	169
Miklík D.....	102, 177
Mikšíková E.....	96
Míkula M.....	193
Mikulajová A.....	125
Mikulášek P.....	203
Mikysek P.....	159
Milata V.....	120
Mizera J.....	199
Mlynáriková J.....	96, 163
Modrocká V.....	178
Moncol J.....	98, 187
Monteiro S.....	178
Mori K.....	106
Mortet V.....	73
Mosinger J.....	153
Mosnáček J.....	110, 155, 189
Mošková J. D.....	111
Mravec B.....	179, 182
Mrlík M.....	189
Můčka V.....	115, 199
Můdra E.....	82, 87, 90, 164
Mucha J.....	134

N

Navrátilová Z.....	159
Nedvěd M.....	73
Nemčovič M.....	134
Němec M.....	200
Němec P.....	141
Némethová I.....	167
Nepraš M.....	102
Netriová Z.....	96, 164
Neubertová V.....	155
Neužilová B.....	199
Nógellová Z.....	107, 192, 209
Noskovič J.....	70
Noskovičová E.....	80, 150
Novák D.....	74
Novák I.....	107, 196
Nováková G.....	101, 185
Novotná V.....	103
Novotná Z.....	156
Novotný L.....	203, 204
Nový Z.....	89, 184
Nudehi S.....	96

O

Oksuz U. A.....	193
Omastová M.....	88, 93, 193
Ondrák L.....	115
Ondrej M.....	134
Oravec J.....	193
Oriňák A.....	82, 86, 87, 90, 133
Oriňáková R.....	82, 86, 87, 90, 133
Ormandyová K.....	179
Orság P.....	75

P

Paidar M.....	129
Pakanová Z.....	134
Palacka D.....	136
Palarčík J.....	201, 204, 206
Pálka K.....	95, 158, 163
Pálková Y.....	205
Palszegi T.....	194
Palumbo R.....	96
Paluš J.....	209
Panáček A.....	89, 91, 92
Pánek J.....	104, 109
Páral P.....	105, 190
Pařízek M.....	191
Pastoreková S.....	88

Pastva O.	174
Patočka J.	142
Pauk K.	178
Pavelová R.	178
Pavlík J.	178
Pavlinec J.	196
Pavliš O.	85
Pazdera P.	137, 140
Pätoprstý V.	146
Pejchal V.	180
Pejchalová M.	180
Peňaška T.	179, 181
Petr M.	83
Petra L.	94
Petráňková R.	203
Petrovičová T.	69
Petruš O.	87, 90
Petřík M.	89, 184
Piátek P.	142
Pisula W.	94
Pišlová M.	156
Pitucha T.	106
Plevová K.	179, 182
Podlesný J.	182
Poláková K.	153
Polívková M.	157
Poryvai A.	103
Pospíšilová Š.	169
Potocká K. E.	122
Pouzar M.	142
Prášek T.	200
Prášilová J.	118
Pravda M.	106
Preťo J.	193, 196
Pribus M.	151
Procházka M.	93, 107, 193, 209
Procházka V.	199
Procházková S.	143
Prucek R.	83, 87, 89, 91, 92
Puchart V.	99
Puchřová E.	99, 100
Pujol C. A.	196
Putala M.	168, 172

R

Rabyk M.	104, 105, 190, 192, 194
Radoňák J.	87
Rajec P.	112
Rakhmatullin A.	164
Ranc V.	86, 87
Rangelov S.	104
Rapta P.	81, 148

Rebroš M.	69
Reguli J.	118
Reichová V.	143
Rejšek J.	135
Remenec B.	113
Repovsky D.	194
Revenco D.	205
Rišpanová L.	110
Röderová M.	92
Rosenberg M.	69
Rossmeislová L.	139
Rozumová L.	210
Ruppenthalová L.	151
Ruszala M.	93
Růžicková Z.	180
Rybáčková M.	201
Rychlá L.	189
Rychlý J.	189

Ř

Řehulka P.	136
Řezanka P.	88, 144

S

Sabalová M.	82
Sakmár M.	89
Salaj P.	174
Sang J.	106, 193
Sedláček O.	104, 109, 184, 190
Sedlák M.	101, 171, 185
Sedláková H. M.	87
Sedlářová I.	138
Sedmidubský D.	116
Sedničková M.	111, 192
Sekretár S.	124, 126, 127
Sember V.	161
Sepelak J.	194
Sharma V. K.	83
Shepa I.	164
Shylenko O.	87
Schmidt Š.	124, 126, 127
Schoeller M.	98
Schwarzová K.	73
Siegel J.	157
Sirotek V.	119
Sivák L.	195
Sivý J.	146
Sklenářová H.	145
Slepička P.	156
Slezák M.	201

Slováková M.	125
Slušná L.	152
Smékalová M.	92
Smolíček M.	104
Socha L.	185
Sochor J.	202, 205, 206
Sochorova L.	205, 206
Soja G.	165
Sokol J.	147
Solich P.	145
Spišáková M.	183
Srančíková A.	172
Stanová I.	201
Staszek M.	157
Stojarová K.	142
Stolaříková J.	175, 187
Stránská M.	133
Strečanská K.	82
Strečková M.	82, 164
Strišovská J.	114
Studenovský M.	195
Suchomel P.	89, 91
Suttnar J.	174
Svoboda J.	103, 185
Svobodová M.	185
Svobodová R. A.	150
Svrčková M.	74
Sýkora D.	76
Sýkora V.	153
Syrová Z.	85

Š

Šafař P.	146
Šácha M.	153
Šajgalík P.	66
Šalovská B.	134
Šandrik R.	183
Šebela M.	92
Šebest P.	75, 138, 144
Šebesta F.	197
Šebesta R.	67, 167, 175, 178, 179, 182, 186
Šedová P.	195
Šefc L.	105, 153, 156, 190, 192
Šelešovská R.	73, 74
Šesták S.	134
Šiffalovič P.	88
Šimek M.	201
Šimko F.	164
Šimon P.	78, 79, 152
Šimurda M.	96
Šišková A.	93
Šišoláková I.	86, 133

Škodáčková D.	123
Šlang S.	95, 158, 163
Šlouf M.	111, 189
Špaček J.	75
Špendlíková I.	200
Špírková M.	112
Špitalský Z.	88, 107, 191, 192
Štefuca V.	202
Štěpánek P.	85, 104, 109, 192, 194
Štěpánková M.	73
Štěpánková Š.	145, 171
Štěpánková V.	84
Štikarová J.	174
Štolcová M.	209
Štrofová J.	119
Šulcová P.	67
Šurina I.	127
Švadlák D.	84
Švajdlenková H.	191
Švec P.	104, 184
Švorc L.	72
Švorčík V.	155, 156, 157

T

Tajer J.	198
Tarabová D.	102
Tatarová D.	115
Tatárová D.	114
Taylor A.	73
Tichý A.	134
Tisovský P.	103, 183
Tomčík P.	72
Trousil J.	85, 104, 111
Trousil V.	201, 204, 206
Tuček J.	83
Tůma P.	139
Turjan J.	196
Tvaroška I.	173
Tydlitát J.	167, 186

U

Uher M.	120
Uhliariková I.	146
Ulrichová J.	150
Urbánek T.	104, 111

V

Vacek J.	74
Valent I.	151

Valko M.	68
Vaníčková M.	205
Vanko V.	196
Vargová D.	186
Vargová Z.	97
Vašková I.	131
Vatehová Z.	207
Vavro M.	151
Večeřová R.	92
Velebný v.	106
Velebný V.	84
Velič D.	80, 148, 150, 152, 194, 209
Venclíková K.	192
Venstrom L. J.	96
Veselá M.	190
Veteška P.	160
Vetrík M.	104, 191
Veverková E.	178
Vídenský J.	138
Vidláková P.	138, 144
Viglasova E.	165
Vilková M.	97
Vinklárek J.	165, 188
Vinšová J.	175, 187
Višňovský J.	202
Vít J.	207, 210
Vlček J.	93
Vlček M.	95, 158, 163
Vlk M.	89
Vojtylová T.	76
Vorčáková K.	145, 171
Vostálová J.	150
Vrábel V.	146

Vrkoslav V.	135
Vykydalová A.	78, 79, 152
Vyskočilová E.	208
Vysopal M.	107

W

Wagnerová L.	91
Weidlich T.	121, 128
Weis M.	183

Z

Záborský O.	187
Zachariášová A.	133
Záruba K.	144
Zatloukalová M.	74
Zaťovičová M.	88
Závišová V.	88
Zbořil R.	83, 86, 87, 92
Zelená M.	136
Zeman M.	166
Ziburová J.	134
Zichová S.	136
Zima J.	132, 139
Zurowska M.	76

Ž

Žemlička L.	125
Žigo O.	107, 192
Živný O.	161

PROGRAM PREDNÁŠOK

Plenárne prednášky

Utorok, 12. september 2017

Predsedaajúci: **M. Omastová**

- 10:30 - 11:30 PLP Pavol Šajgalík
KERAMIKA NA BÁZE NITRIDU KREMIČITÉHO – ÚŽASNÁ
MNOHORAKOSŤ JEJ POUŽITIA
- 12:30 - 14:00
Obed, Hotel Bellevue
Predsedaajúci: **J. Híveš**
- 14:00 - 14:45 PP1 Karel Bouzek
KONVERZE A SKLADOVÁNÍ ENERGIE JAKO ŽHAVÉ TÉMA
VYSPĚLÝCH EKONOMIK. A JAKÁ JE NAŠE POZICE?
- 14:45 - 15:30 PP2 Radovan Šebesta
ASYMETRICKÁ ORGANOKATALÝZA A ZELENÁ CHÉMIA –
IDEÁLNE PARTNERSTVO
- 15:30 - 16:00
Občerstvenie, Hotel Bellevue

Streda, 13. september 2017

Predsedaajúci: **P. Šimon**

- 09:00 - 09:45 PP3 Petra Šulcová
ANORGANICKÉ PIGMENTY: OD PRAVĚKU PO SOUČASNOST
- 09:45 - 10:30 PP4 Marián Valko
OXIDAČNÝ STRES V ŽIVÝCH SYSTÉMOCH INDUKOVANÝ KOVMI
- 10:30 - 10:50
Občerstvenie, Hotel Bellevue
Predsedaajúci: **V. Milata**
- 10:50 - 11:20 P1 Igor Goljer
IDENTIFIKÁCIA METABOLITOV VO FARMACEUTICKOM
VÝSKUME
- 11:20 - 11:45 P2 Mariana Danková
NOVÉ TECHNOLOGIE PRE NOVÉ VÝZVY
- 11:45 - 12:05 P3 Monika Babíková
ANTON PAAR PRINÁŠA INOVATÍVNE RIEŠENIA PRE CHEMIKOV
- 12:05 - 12:30 P4 Jaroslav Noskovič
OCHRANA A ZHODNOTENIE VÝSLEDKOV VÝSKUMU A VÝVOJA
NA SLOVENSKU
- 12:30 - 14:00
Obed, Hotel Bellevue

Štvrtok, 14. september 2017

Predsedaajúci: **J. Moncol'**

- 14:00 - 14:45 PP5 Peter Baran
KOORDINAČNÁ CHÉMIA N-OXIDOV AROMATICKÝCH AMÍNOV
- 14:45 - 15:30 PP6 Martin Rebroš, Kristína Markošová, Vladimír Krasňan, Tatiana Petrovičová,
Michal Rosenberg
BIOKATALÝZA - NÁSTROJ NA PRÍPRAVU CHEMIKÁLIÍ
- 15:30 - 16:00
Občerstvenie, Hotel Bellevue

Piatok, 15. september 2017

Predsedaajúci: **P. Šimon, V. Milata**

09:30 - 10:15 P5 Miroslav Križ

HUBY AKO ICH NEPOZNÁME

10:15 - 10:45 *Občerstvenie, Hotel Bellevue*

Sekcia 1: Analytická chémia

Streda, 13. september 2017

Predsedaajúci: **L. Švorc**

- | | | |
|---------------|------|--|
| 14:00 - 14:15 | 1P01 | <u>Lubomír Švorc</u>
PERSPEKTÍVNE ELEKTROCHEMICKÉ SENZORY NA BÁZE DOPOVANÝCH DIAMANTOVÝCH ELEKTROD |
| 14:15 - 14:45 | 1P02 | <u>Peter Tomčík</u> , Zuzana Chomisteková-Lukáčová, Eva Culková, Renata Bellová, Danica Melicherčíková
REAKČNÁ ELEKTROANALÝZA NA ELEKTRODE Z DIAMANTU DOPOVANÉHO BÓROM: STANOVENIE CÍNU V BRONZOCH PRE KORDY PNEUMATÍK |
| 14:45 - 15:00 | 1P03 | <u>Renáta Šelešovská</u> , Pavlína Martinková, Michaela Štěpánková, Lenka Janíková, Jaromíra Chýlková
BOREM DOPOVANÉ DIAMANTOVÉ ELEKTRODY V ELEKTROANALÝZE LÉČIV |
| 15:00 - 15:15 | 1P04 | <u>Karolina Schwarzová</u> , Simona Baluchová, Michal Nedvěd, Ivan Dittert, Jan Krůšek, Veronika Benson, Vincent Mortet, Andrew Taylor
PLANAR AND POROUS NANOCRYSTALLINE BORON-DOPED DIAMOND ELECTRODES FOR ELECTROANALYSIS: COMPARISON OF SPECTRAL, MORPHOLOGICAL AND ELECTROCHEMICAL PROPERTIES |
| 15:15 - 15:30 | 1P05 | <u>Jaromíra Chýlková</u> , Renáta Šelešovská, Lenka Janíková
ANALÝZA ROSTLINNÝCH STIMULÁTORŮ ELEKTROCHEMICKÝMI METODAMI |
| 15:30 - 16:00 | | Občerstvenie, Hotel Bellevue |
| | | Predsedaajúci: P. Tomčík, R. Šelešovská |
| 16:00 - 16:15 | 1P06 | <u>David Novák</u> , Marika Svrčková, Martina Zatloukalová, Jan Vacek
VYUŽITÍ ELEKTROCHEMIE PRO STUDIUM MODIFIKACE PROTEINŮ REAKTIVNÍMI PRODUKTY METABOLISMU |
| 16:15 - 16:30 | 1P07 | <u>Monika Hermanová</u> , Miroslav Fojta
ELECTROCHEMICAL ANALYSIS OF PRODUCTS OF TERMINAL DEOXYNUCLEOTIDYL TRANSFERASE TAILING REACTION USING INTRINSIC ELECTROACTIVITY OF NUCLEOBASES |
| 16:30 - 16:45 | 1P08 | <u>Miroslav Fojta</u> , Jan Špaček, Peter Šebest, Aleš Daňhel, Petr Orság, Luděk Havran
CATALYSIS OF HYDROGEN EVOLUTION BY MODIFIED DNA AT MERCURY-BASED ELECTRODES AND ITS ANALYTICAL UTILIZATION |
| 16:45 - 17:00 | 1P09 | <u>Michal Kohout</u>
ENANTIOMERNÍ SEPARACE NOVÝCH SYNTETICKÝCH DROG V RŮZNÝCH CHROMATOGRFICKÝCH MÓDECH |

- 17:00 - 17:15 1P10 T. Vojtylová, M. Cigl, M. Kašpar, I. Korbecka, M. Zurowska, V. Hamplová, D. Sýkora
CHIRÁLNE SEPARÁCIE KVAPALNE-KRYŠTALICKÝCH MATERIÁLOV: VÝVOJ A OPTIMALIZÁCIA SEPARAČNÝCH METÓD PRE TYČINKOVITÉ MATERIÁLY POMOCOU HPLC NA CHIRÁLNYCH STACIONÁRNYCH FÁZACH
- 17:15 - 17:30 1P11 Alena Manová, Martin Kroliak, Ernest Beinhrohr
DETERMINATION OF HYDRIDE FORMING ELEMENTS BY ATOMIC ABSORPTION SPECTROMETRY
- 17:30 - 17:45 1P12 Anna Krejčová, Lenka Bendakovská, Tereza Lexová
PRETREATMENT STEPS IN ELEMENTAL ANALYSIS OF HAIR
- 17:45 - 18:00 1P13 Karel Klepárník
VYUŽITÍ MIKRO- A NANO-TECHNOLOGIÍ PRO ANALÝZU CHEMICKÉHO OBSAHU JEDINÉ BUŇKY
- 18:30 - 20:00 *Večera, Hotel Bellevue*

Sekcia 2: Fyzikálna chémia

Štvrtok, 14. september 2017

Predsedajúci: **M. Valko, P. Rapta**

- | | | |
|---------------|------|--|
| 16:00 - 16:15 | 2P01 | <u>Tibor Dubaj</u> , Peter Šimon, Zuzana Cibulková, Anna Vykydalová
A MINIMAL PHYSIOLOGICALLY BASED PHARMACOKINETIC MODEL FOR NANOPARTICLES BIODISTRIBUTION |
| 16:15 - 16:30 | 2P02 | <u>Zuzana Cibulková</u> , Anna Vykydalová, Tibor Dubaj, Peter Šimon
THERMOOXIDATIVE STABILITY OF POLYPROPYLENE/TiO ₂ AND POLYPROPYLENE/LAYERED SILICATE NANOCOMPOSITES |
| 16:30 - 16:45 | 2P03 | <u>Anna Vykydalová</u> , Zuzana Cibulková, Tibor Dubaj, Peter Šimon
THERMOOXIDATIVE STABILITY OF ORGANIC SEMICONDUCTING MATERIALS USING NON-ISOTHERMAL DSC MEASUREMENTS |
| 16:45 - 17:00 | 2P04 | <u>Eva Noskovičová</u> , Dušan Lorenc, Dušan Velič
OD STATICKEJ THZ SPEKTROSKOPIE K THZ PUMP-PROBE EXPERIMENTU |
| 17:00 - 17:15 | 2P05 | <u>Lenka Slušná</u> , Ľudovít Haizer, Dimitrij Bondarev, Dušan Velič
ŠTÚDIUM DYNAMIKY ABSORPCIE A FLUORESCENCIE POLYTIOFÉNOV NA PRÍPRAVU SOLÁRNYCH ČLÁNKOV |
| 17:15 - 17:30 | 2P06 | <u>Peter Rapta</u>
IN SITU EPR AND UV-VIS-NIR SPECTROELECTROCHEMISTRY AS A UNIQUE TOOL FOR REDOX MECHANISMS STUDIES OF COORDINATION COMPOUNDS |
| 17:30 - 17:45 | 2P07 | Karina Strečanská, <u>Milan Mazúr</u>
ANALYSIS OF COPPER COMPLEXES WITH BIOLOGICALLY ACTIVE LIGANDS |
| 17:45 - 18:00 | 2P08 | <u>Renáta Oriňaková</u> , Magdaléna Strečková, Mária Sabalová, Erika Múdra, Andrej Oriňak
REAKCIA VYLUČOVANIA VODÍKA KATALYZOVANÁ UHLÍKOVÝMI VLÁKNAMI DOPOVANÝMI KOVOVÝMI NANOČASTICAMI |
| 18:00 - 18:15 | 2P09 | <u>Jana Jaklová Dytrtová</u> , Michal Jakl, Václav Kašíčka
REACTIONS OF COPPER (II) IN ELECTROSPRAY |
| 18:15 - 18:30 | 2P10 | <u>Jan Kolařík</u> , Robert Pucek, Jiří Tuček, Jan Filip, Martin Petr, Virender K. Sharma, Radek Zbořil
REDUKCE ARSENIČNANŮ A ARSENITANŮ POMOCÍ NULAMOCNÉHO ŽELEZA: ÚČINNÁ STRATEGICKÉ ODSTRANĚNÍ ARSENU Z VODY |
| 18:30 - 18:45 | 2P11 | <u>Zdzisław Kinart</u>
THE VOLUMETRIC STUDIES OF SELECTED ELECTROLYTES IN MIXTURES OF WATER WITH ALKOXYALCOHOLS |
| 18:45 - 19:00 | 2P12 | <u>Daniel Švadlák</u> , Josef Chmelař, Veronika Štěpánková, Kristýna Lipenská, Vladimír Velebný
POKROČILÁ ANALÝZA DISOLUČNÍCH DAT |

Sekcia 3: Nanomateriálová chémia

Utorok, 12. september 2017

Predsedaajúci: **L. Kvítek**

- | | | |
|---------------|------|---|
| 16:00 - 16:30 | 3P01 | <u>Zoran Markovic</u>
BIOMEDICAL APPLICATION OF CARBON QUANTUM DOTS |
| 16:30 - 16:45 | 3P02 | <u>Jiří Trousil</u> , Jana Matějková, Zdeňka Syrová, Oto Pavliš, Petr Štěpánek, Martin Hrubý
ERADIKACE INTRACELULÁRNĚ PERZISTUJÍCÍCH BAKTERIÍ POMOCÍ NANOČÁSTIC |
| 16:45 - 17:00 | 3P03 | <u>Anna Balzerová</u> , Ariana Fargašová, Václav Ranc, Radek Zbořil
MULTIPLEXNÍ ANALÝZA NÁDOROVÝCH MARKERŮ HER2 A EpCAM V LIDSKÉ KRVÍ POMOCÍ NANOKOMPOZITU Fe ₂ O ₃ @Ag A MAGNETICKY ASISTOVANÉ POVRCHEM ZESÍLENÉ RAMANOVY SPEKTROSKOPIE (MA-SERS) |
| 17:00 - 17:15 | 3P04 | <u>Ivana Šišoláková</u> , Jana Hovancová, Renáta Oriňáková, Andrej Oriňák
ELEKTROCHEMICKÁ DETEKCIA INZULÍNU NA MIRKOELEKTRODACH MODIFIKOVANÝCH NANOČASTICAMI |
| 17:15 - 17:30 | 3P05 | <u>Ariana Fargašová</u> , Anna Balzerová, Robert Pucek, Miroslava Htoutou Sedláková, Kateřina Bogdanová, Jiří Gallo, Milan Kolář, Václav Ranc, Radek Zbořil
PŘEDOPERAČNÍ DIAGNOSTIKA INFEKČÍ KLOUBNÍCH NÁHRAD METODOU MAGNETICKY ASISTOVANÉ POVRCHEM ZESÍLENÉ RAMANOVY SPEKTROSKOPIE (MA-SERS) |
| 17:30 - 17:45 | 3P06 | <u>Zuzana Orságová Králová</u> , Andrej Oriňák, Renáta Oriňáková, Jozef Radoňák, Lucia Lakyová, Ondrej Petruš, Erika Múdra, Oleg Shylenko
NANOROZMERNÉ STRIEBORNÉ VRSTVY V SKRÍNINGOVEJ SERS ANALÝZE ZÁVAŽNÝCH OCHORENÍ |
| 17:45 - 18:00 | 3P07 | <u>Jakub Koktan</u> , Ondřej Kaman, Pavel Řezanka
NANOČÁSTICE PRO DISPERZNÍ MAGNETICKOU SEPARACI |
| 18:00 - 18:15 | 3P08 | <u>Nikola Bugárová</u> , Michal Bodík, Peter Šiffalovič, Matej Mičušík, Zdeno Špitálsky, Vlasta Závišová, Martina Konarecká, Miriam Zaťovičová, Silvia Pastoreková, Mária Omastová
GRAFÉN OXIDOVÝ BIOSENZOR NA DETEKCIU ONKOLOGICKÝCH CHORENÍ |
| 18:15 - 18:30 | 3P09 | <u>Volodymyr Lobaz</u> , Zbynek Novy, Sona Gurska, Michal Sakmár, Ekaterina Kukleva, Martin Vlk, Ján Kozempel, Milos Petrik, Martin Hruby
TWO STAGE TUMOR DIAGNOSTICS BASED ON HYDROXYAPATITE NANOPARTICLES WITH POLYMER CORONA |
| 18:30 - 20:00 | | <i>Večera, Hotel Bellevue</i> |

Štvrtok, 14. september 2017

Predseda júci: **M. Omastová**

09:00 - 09:30 3P010 Libor Kvítek, Aleš Panáček, Robert Pucek, Šárka Hradilová, Lucie Hochvaldová, Petr Suchomel

KATALYTICKÁ AKTIVITA NANOČÁSTIC KOVŮ – MODEL Y A MODELOVÉ REAKCE

09:30 - 09:45 3P011 Ondrej Petruš, Andrej Oriňak, Renáta Oriňaková, Zuzana Orságová Králova, Miriam Kupková, Erika Múdra

Ni NANOKAVITOVÉ FILMY DEKOROVANÉ Ag NANOČASTICAMI PRE SERS APLIKÁCIE

09:45 - 10:00 3P012 Robert Pucek, Petr Suchomel, Aleš Panáček, Linda Wagnerová, Libor Kvítek

SONOCHEMICKÁ PŘÍPRAVA VRSTEV ČÁSTIC STŘÍBRA NA SKLENĚNÉM PODKLADU PRO ÚČELY POVRCHEM ZESÍLENÉ RAMANOVY SPEKTROSKOPIE

10:00 - 10:15 3P013 Lucie Hochvaldová, Libor Kvítek

VLIV REDOXNÍHO POTENCIÁLU REDUKČNÍ LÁTKY NA SYNTÉZU NANOČÁSTIC STŘÍBRA

10:15 - 10:30 3P014 Aleš Panáček, Libor Kvítek, Monika Smékalová, Renata Večeřová, Milan Kolář, Magdalena Röderová, Marek Šebela, Robert Pucek, Radek Zbořil

REZISTENCE BAKTERIÍ VŮČI NANOČÁSTICÍM STŘÍBRA

10:30 - 11:00 *Občerstvenie, Hotel Bellevue*

Predseda júci: **R. Oriňaková**

11:00 - 11:15 3P015 Šárka Hradilová, Aleš Panáček, Robert Pucek, Libor Kvítek, Jiří Gallo

ANTIBAKTERIÁLNÍ POVRCHOVÁ ÚPRAVA ORTOPEDICKÝCH IMPLANTÁTŮ NA BÁZI NANOČÁSTIC STŘÍBRA

11:15 - 11:30 3P016 Eliška Číková, Alena Šišková, Matej Mičušík, Zdenka Capáková, Michal Procházka, Mária Omastová

VODIVÉ POLYMÉRNE NANOVLÁKNA PRIPRAVENÉ ELEKTROSTATICKÝM ZVLÁKŇOVANÍM

11:30 - 11:45 3P017 Jakub Vlček, Lubomír Lapčík, Matthew Ruzsala

VYUŽITÍ DUTÝCH NANOČÁSTIC CaCO₃ PRO TECHNICKE APLIKACE

11:45 - 12:00 3P018 Hanna Makowska, Cunbin An, Tomasz Marszalek, Wojciech Pisula, Martin Baumgarten

FLUORINATION OF NAPHTHALENEDIIMIDE-BENZOTHIADIAZOLE- BASED DUAL-ACCEPTOR COPOLYMERS FOR AMBIPOLAR FIELD-EFFECT TRANSISTORS

12:30 - 14:00 *Obed, Hotel Bellevue*

Sekcia 4: Anorganická a materiálová chémia

Štvrtok, 14. september 2017

Predsedaajúci: **J. Moncol', P. Baran**

- | | | |
|---------------|------|--|
| 16:00 - 16:30 | 4P01 | <u>Peter Komadel</u> , Lukáš Petra
ON THE ATTRACTIVITY OF BENTONITES AND CLAY MINERALS FOR THE CHEMISTS |
| 16:30 - 17:00 | 4P02 | <u>Miroslav Vlcek</u> , Karel Palka, Stanislav Slang, Liudmila Loghina, Jan Buzek, Anastasia Iakovleva
FYZIKÁLNÍ A CHEMICKÁ PODSTATA MIKRO A NANO-STRUKTUROVÁNÍ CHALKOGENIDOVÝCH SKEL |
| 17:00 - 17:30 | 4P03 | <u>Miroslav Boča</u>
XPS AND NMR SPECTROSCOPY OF TERNARY FLUORIDES |
| 17:30 - 17:45 | 4P04 | R. Palumbo, <u>M. Korenko</u> , N. Leonard, L.J. Venstrom, S. Nudahi, R. Diver, C. Larson, K. Blood, P.T. Kissinger
SOLAR THERMAL ELECTROLYTIC PRODUCTION OF MAGNESIUM FROM MOLTEN FLUORIDES: ELECTROCHEMICAL REACTION KINETICS, MASS TRANSPORT AND REFLECTIONS ON COMMERCIAL VIABILITY |
| 17:45 - 18:00 | 4P05 | <u>Blanka Kubíková</u> , Jarmila Mlynáriková, Eva Mikšíková, Z. Netriová, M. Šimurda, M. Boča
COMPARISON OF PHYSICO-CHEMICAL PROPERTIES OF MOLTEN SYSTEMS BASED ON LANTHANUM FLUORIDE |
| 18:00 - 18:30 | 4P06 | Miroslava Litecká, <u>Zuzana Vargová</u> , Róbert Gyepes, Miroslav Almáši, Mária Vilková
MAKROCYKLICKÉ LIGANDY AKO CHELÁTORY ŤAŽKÝCH KOVOV |
| 18:30 - 18:45 | 4P07 | <u>Petra Masárová</u> , Vladimír Kuchtanin, Milan Mazúr, Ján Moncol
STRUCTURES, EPR SPECTRA AND MAGNETISM OF TRANSITION METAL DIPICOLINATES WITH N-DONOR LIGANDS |
| 18:45 - 19:00 | 4P08 | <u>Jan Moncol</u> , Martin Schoeller, Mario Izakovič
STRUCTURALLY DIVERSE MANGANESE(III)-SALEN COMPLEXES WITH BRIDGING FORMATE LIGAND |

Sekcia 5: Organická chémia

Utorok, 12. september 2017

Predsedaajúci: **R. Šebesta**

- 17:15 - 17:30 5P01 Marek Baráth, Ján Hirsch, Vladimír Puchart, Peter Biely
POTENTIAL CHROMOGENIC SUBSTRATE FOR GH30
GLUCURONOXylanases – A TOTAL SYNTHESIS
- 17:30 - 17:45 5P02 Pavol Jakubec, Eva Puchľová, Dušan Berkeš
KRYŠTALIZÁCIOU-INDUKOVANÁ ASYMETRICKÁ TRANSFOR-
MÁCIA - MODERNÝ NÁSTROJ ORGANICKEJ SYNTÉZY
- 17:45 - 18:00 5P03 Eva Puchľová, Jozef Markus, Dušan Berkeš
EFEKTÍVNA SYNTÉZA FUNKCIONALIZOVANÝCH PYROLIDÍNŮV
- 18:30 - 20:00 *Večera, Hotel Bellevue*

Štvrtok, 14. september 2017

Predsedaajúci: **J. Hanusek, M. Sedlák**

- 16:00 - 16:15 5P04 Miloš Sedlák
ENANTIOSELEKTIVNÍ KATALYZÁTORY ZAKOTVENÉ NA
PERLOVÝCH KOPOLYMERECH STYRENU
- 16:15 - 16:30 5P05 Gabriela Nováková, Pavel Drabina, Miloš Sedlák
MĚDNATÉ KOMPLEXY 2-(PYRIDIN- 2-YL)IMIDAZOLIDIN- 4-
THIONŮ JAKO ENANTIOSELEKTIVNÍ KATALYZÁTORY PRO
HENRYHO REAKCI
- 16:30 - 17:00 5P06 Jonathan P. Hill, David Miklík, Matsushita, Jan Labuta, Katsuhiko Ariga
PYRAZINACENES AND OXOPORPHYRINOGENS
- 17:00 - 17:15 5P07 Jiří Hanusek, Richard Kammel, Denisa Tarabová, Miloš Nepraš
2,5-DIARYL- 4-HYDROXY- 1,3-THIAZOLY S FLUORESCENČNÍMI
VLASTNOSTMI
- 17:15 - 17:30 5P08 Anna Poryvai, Michal Kohout, Vladimíra Novotná, Jiří Svoboda
MAGNETICKÉ NANOČÁSTICE STABILIZOVANÉ V KAPALNĚ-
KRYSALICKÝCH MATRICÍCH
- 17:30 - 17:45 5P09 Pavol Tisovský, Miroslav Horváth, Jana Donovalová, Anton Gáplovský
FOTOCHEMICKÁ KONTROLA UVOĽŇOVANIA, RESP. VIAZANIA
KATIÓNOV KOVOV Z KOMPLEXOV DIARYLHYDRAZÓNOV

Sekcia 6: Polyméry

Utorok, 12. september 2017

Predsedaajúci: **M. Danko**

- 16:00 - 16:30 6P01 Martin Hrubý, Lenka Loukotová, Jan Kučka, Maria Rabyk, Jiří Trousil, Tomáš Urbánek, Jiří Pánek, Volodymyr Lobaz, Kristýna Kolouchová, Pavel Švec, Miroslav Vetrík, Lucie Kománková, Ondřej Sedláček, Petr Štěpánek
SUPRAMOLEKULÁRNÍ SAMOUSPOŘÁDANÉ POLYMERNÍ SYSTÉMY PRO DIAGNOSTIKU A TERAPII
- 16:30 - 16:45 6P02 Maroš Smolíček, Zuzana Kroneková, Emi Haladjova, Stanislav Rangelov, Juraj Kronek
CATIONIC POLY(2-OXAZOLINES) FOR GENE DELIVERY
- 16:45 - 17:00 6P03 Lenka Loukotová, Jan Kučka, Martin Hrubý, Maria Rabyk, Pavla Francová, Věra Kolářová, Petr Páral, Tomáš Heizer, Luděk Šefc
IMUNORADIOTERAPEUTICKÝ HYBRIDNÍ POLYMERNÍ SYSTÉM
- 17:00 - 17:15 6P04 Jana Baťová, Tomáš Pitucha, Jiří Běťák, Kateřina Knotková, Martin Pravda, Vladimír Velebný
VÝVOJ NOVÝCH TYPŮ DERIVÁTŮ KYSELINY HYALURONOVÉ S AKTIVNÍ LÁTKOU POUŽÍVANÉ PRO PŘÍPRAVU VLÁKEN
- 18:00 - 18:15 6P05 Jing Sang, Sumio Aisawa, Hidetoshi Hirahara, Kunio Mori
BONDING PROPERTIES OF ACRYLNITRIL BUTADIENE RUBBER WITH POLYAMIDE MEDIATED BY A FUNCTIONAL LAYER OF SILANE COUPLING AGENT
- 18:15 - 18:30 6P06 Zdenko Špitalský, Mária Kováčová, Ondrej Žigo, Igor Novák, Angela Kleinová, Matej Mičušík, Zuzana Nógellová, Dana Rástočná Illová
VÝSKUM VPLYVU NÍZKOTEPLOTNEJ PLAZMY NA ZVÝŠENIE PERMANENTNOSTI POVRCHOVEJ ÚPRAVY TEXTILNÝCH MATERIÁLOV S POUŽITÍM NANOSÓLOV
- 18:30 - 20:00 *Večera, Hotel Bellevue*

Štvrtok, 14. september 2017

Predsedaajúci: **M. Hrubý**

- 09:00 - 09:15 6P07 Ivan Kelnar, Ludmila Kaprálková
POLYMERNÍ SYSTÉMY MODIFIKOVANÉ UHLÍKOVÝMI NANODESTIČKAMI
- 09:15 - 09:30 6P08 Zdenko Špitalský, Janka Kozakovičová, Mária Kováčová, Michal Procházka, Ondrej Žigo, Katarína Csomorová, Marek Vysopal
POLYMÉRNE KOMPOZITY PRE 3D TLAČ
- 09:30 - 09:45 6P09 František Ivanič, Ivan Chodák
ZMES GLYCERÍNU A MOČOVINY AKO ZMÄKČOVADLO NA PŘÍPRAVU TERMOPLASTICKÉHO ŠKROBU

- 09:45 - 10:00 6P10 Zuzana Kroneková, Michal Pelach, Petra Mazancová, Lucia Uhelská, Dušana Treľová, Filip Rázga, Veronika Némethová, Vladimír Raus, James J. McGarrigle, José Oberholzer, Peter Šiffalovič, Igor Lacík
CONFOCAL RAMAN MICROSCOPY OF HYDROGEL MICROSPHERES
- 10:00 - 10:15 6P11 Jiří Pánek, Olga Janoušková, Ondřej Sedláček, Martin Hrubý, Petr Štěpánek
AUTOFLUORESCENCE OF ANTHRACYCLINES OBSERVED BY FLIM
- 10:15 - 10:30 6P12 Zuzana Benková, Lucia Rišpanová, Peter Cifra
STRUCTURE OF LINEAR AND RING MACROMOLECULES CONFINED IN ARRAY OF NANOPOSTS
- 10:30 - 11:00 *Občerstvenie, Hotel Bellevue*
Predsedajúci: **P. Cifra**
- 11:00 - 11:30 6P13 Matin Danko, Slávka Ďurkáčová, Jaroslav Mosnáček
FUNCTIONAL POLYESTERS FROM TULIPALINE A AND ϵ -CAPROLACTONE
- 11:30 - 11:45 6P14 Tomáš Urbánek, Jiří Trousil, Peter Černocho, Soňa Hermanová, Martin Hrubý
ČÁSTICE POLY(ϵ -KAPROLAKTON-CO- γ -BUTYROLAKTON)U PRO MEDICÍNSKÉ POUŽITÍ
- 11:45 - 12:00 6P15 Michaela Sedničková, Daniela Jochec Mošková, Ivica Janigová, Juraj Kronek, Luboš Jankovič, Miroslav Šlouf, Ivan Chodák
POLY(ϵ -CAPROLACTONE)- CLAY NANOCOMPOSITES
- 12:00 - 12:15 6P16 Milena Špírková, Libor Matějka
USPOŘÁDANÉ ALIFATICKÉ POLYURETHANOVÉ ELASTOMERY JAKO MATRICE PRO INTELIGENTNÍ SAMOREGENERUJÍCÍ SE MATERIÁLY
- 12:30 - 14:00 *Obed, Hotel Bellevue*

Sekcia 7: Jadrová chémia

Utorok, 12. september 2017

Predsedajúci: **J. Kuruc, Ľ. Mátel**

- | | | |
|---------------|------|--|
| 16:00 - 16:30 | 7P01 | <u>Pavol Rajec</u>
SKÚSENOSTI Z VÝROBY RÁDIOFARMÁK NA SLOVENSKU |
| 16:30 - 16:45 | 7P02 | <u>Jaroslav Červenák</u> , Ondřej Lebeda
MONITOROVANIE ENERGIE A PRÚDU PROTÓNOVÉHO ZVÄZKU
AKTIVÁCIOU TITÁNOVÝCH A MEDENÝCH FÓLIÍ |
| 16:45 - 17:00 | 7P03 | Petr Distler, <u>Jan John</u>
ACTINOIDS / LANTHANOIDS SEPARATIONS BY NOVEL
BTBP/BTPHEN EXTRACTANTS |
| 17:00 - 17:15 | 7P04 | <u>Silvia Dulanská</u> , Bianka Horváthová, Boris Remenec, Ľubomír Mátel
RÝCHLE STANOVENIE ⁷⁹ SE POMOCOOU KVAPALINOVEJ
SCINTILAČNEJ SPEKTROMETRIE |
| 17:15 - 17:30 | 7P05 | Silvia Dulanská, <u>Ľubomír Mátel</u>
KOMPOZITNÉ SORBENTY S OXIDOM MANGÁNU PRE
ZAKONCENTROVANIE ALFA RÁDIONUKLIDOV |
| 17:30 - 17:45 | 7P06 | <u>Jana Strišovská</u> , Dušan Galanda, Dominika Tatárová
STANOVENIE SAMÁRIA-151 METÓDOU EXTRAČNEJ
CHROMATOGRAFIE |
| 17:45 - 18:00 | 7P07 | <u>Lukáš Ondrák</u> , Viliam Múčka
SLEDOVÁNÍ VYBRANÝCH PARAMETRŮ PŘI OZAŘOVÁNÍ BUNĚK
IONIZUJÍCÍM ZÁŘENÍM |
| 18:00 - 18:15 | 7P08 | <u>Dominika Tatarová</u> , Dušan Galanda, Jozef Kuruc
FYKOREMEDIÁCIA AKO POTENCIÁLNA METÓDA
DEKONTAMINÁCIE VÔD |
| 18:15 - 18:30 | 7P09 | <u>Jozef Kuruc</u>
HIGH-ENERGY CHEMISTRY - INTERDISCIPLINARY science. present
STATE AND PERSPECTIVES OF DEVELOPMENT IN THE SLOVAK
REPUBLIC AND THE CZECH REPUBLIC |
| 18:30 - 20:00 | | <i>Večera, Hotel Bellevue</i> |

Sekcia 8: Vyučovanie a história chémie

Streda, 13. september 2017

Predsedajúci: **J. Reguli, M. Ganajová**

- | | | |
|---------------|------|---|
| 16:00 - 16:15 | 8P01 | <u>Vilém Bartůněk</u> , Ondřej Jankovský, David Sedmidubský
MIKROEXPERIMENTY PRO PŘEDNÁŠKY |
| 16:15 - 16:30 | 8P02 | <u>Hana Čtrnáctová</u> , Mária Ganajová
OBSAH VÝUKY CHEMIE NA ÚROVNI isced 2 & 3 VE 21. STOLETÍ |
| 16:30 - 16:45 | 8P03 | <u>Mária Ganajová</u> , Hana Čtrnáctová, Ivana Sotáková, Mária Siváková
CHEMICKÉ UČEBNÉ ÚLOHY PRE ROZVOJ SPÔSOBILOSTÍ ŽIAKOV |
| 16:45 - 17:00 | 8P04 | <u>Jana Prášilová</u>
POTRAVINY POHLEDEM CHEMIKA – KURZ PRO POSLUCHAČE
UNIVERZITY TŘETÍHO VĚKU |
| 17:00 - 17:15 | 8P05 | <u>Ján Reguli</u>
HODINY CHÉMIE AKO MIESTO BOJA PROTI KONŠPIRÁCIÁM A
HOAXOM |
| 17:15 - 17:30 | 8P06 | <u>Jitka Štrofová</u> , Vladimír Sirotek
PODPORA PŘÍRODOVĚDNÉHO VZDĚLÁVÁNÍ NAKATEDŘE
CHEMIE FPE ZČU |
| 17:30 - 17:45 | 8P07 | <u>Ján Čaplovič</u>
SPOMIENKA NA PROFESORA MIKULÁŠA FURDÍKA (1905 – 1967) |
| 17:45 - 18:00 | 8P08 | <u>Michal Uher</u> , Ľudovít Hallon, Kamil Cejpek, Viktor Milata
HISTÓRIA POTRAVINÁRSKEHO PRIEMYSLU NA SLOVENSKU |
| 18:30 - 20:00 | | <i>Večera, Hotel Bellevue</i> |

Sekcia 9: Životné prostredie, potravinárstvo a biotechnológie

Streda, 13. september 2017

Predsedaajúci: **S. Sekretár**

- | | | |
|---------------|------|---|
| 14:00 - 14:30 | 9P01 | <u>Igor Bodík</u> , Tomáš Mackuľák
FAJČÍŠ, PIJEŠ, DROGUJEŠ? ČO VIEME ZISTIŤ O VÁS Z
ODPADOVÝCH VÔD |
| 14:30 - 14:45 | 9P02 | <u>Libor Dušek</u> , Tomáš Weidlich
ČIŠTĚNÍ ODPADNÍCH VOD Z VÝROBY PIGMENTU YELLOW 183 |
| 14:45 - 15:15 | 9P03 | Katarína Kopčová, Daniel Jancura, <u>Marián Fabián</u>
RADIKÁLY V KATALÝZE RESPIRAČNÝCH OXIDÁZ |
| 15:15 - 15:30 | 9P04 | Elena Karnišová Potocká, Mária Mastihubová, Peter Kis, <u>Vladimír Mastihuba</u>
ENZÝMOVÁ PRÍPRAVA PRÍRODNÝCH FENYLETANOIDNÝCH
GLYKOZIDOV A ICH ANALÓGOV |
| 15:30 - 16:00 | | <i>Občerstvenie, Hotel Bellevue</i> |
| | | Predsedaajúci: Š. Schmidt |
| 16:00 - 16:15 | 9P05 | <u>Body Patrik</u> , Greif Gabriel, Škodáčková Denisa, Horná Dominika, Greifová
Mária
VYUŽITIE MIKROORGANIZMOV PRI ODBÚRAVANÍ TYRAMÍNU
V MODELOVÝCH PODMIENKACH |
| 16:15 - 16:45 | 9P06 | <u>Karel Cejpek</u> , Kateřina Formánková
ANTIOXIDAČNÍ KAPACITA NEROZPUSTNÝCH PODÍLŮ POTRAVIN
ROSTLINNÉHO PŮVODU |
| 16:45 - 17:00 | 9P07 | <u>Zuzana Ciesarová</u> , Kristína Kukurová, Viera Jelemenská, Martina
Benčíčová, Mária Kopuncová, Jana Horváthová
RAKYTNÍK REŠETLIAKOVÝ – VÝZNAMNÝ ZDROJ VOĽNÝCH
AMINOKYSELÍN |
| 17:00 - 17:15 | 9P08 | <u>Zuzana Burčová</u> , František Kreps, Štefan Schmidt, Stanislav Sekretár
RAKYTNÍK REŠETLIAKOVÝ AKO ZDROJ BIOLOGICKY
AKTÍVNYCH LÁTKOV |
| 17:15 - 17:30 | 9P09 | <u>Kristína Kukurová</u> , Zuzana Ciesarová, Viera Jelemenská, Martina
Benčíčová, Mária Kopuncová, Jana Horváthová, Ľubomír Daško
HODNOTENIE ZDRAVOTNEJ BEZPEČNOSTI VÝROBKOV S
OBSAHOM RAKYTNÍKA Z HĽADISKA VZNIKU PROCESNÝCH
KONTAMINANTOV |
| 17:30 - 17:45 | 9P10 | <u>Eva Hybenová</u> , Anna Mikulajová, Lukáš Žemlička, Monika Slováková
BRUSNICE AKO ZDROJ ZDRAVIU PROSPEŠNÝCH LÁTKOV |
| 17:45 - 18:15 | 9P11 | <u>Stanislav Sekretár</u> , Zuzana Burčová, František Kreps, Štefan Schmidt
BILANCIA PRÍJMU NUTRIENTOV V STRAVE ČLOVEKA |
| 18:30 - 20:00 | | <i>Večera, Hotel Bellevue</i> |

Štvrtok, 14. september 2017

Predseda júci: **V. Mastihuba**

- | | | |
|---------------|------|---|
| 18:00 - 18:30 | 9P12 | <p><u>J. Čársky</u>
 VOLNÉ RADIKÁLY A OXIDAČNÝ STRES VERSUS OCHRANNÉ ANTIOXIDANTY – NOVÉ PREKVAPUJÚCE ZISTENIA</p> |
| 18:30 - 18:45 | 9P13 | <p><u>František Kreps</u>, Zuzana Burčová, Štefan Schmidt, Stanislav Sekretár
 BIOLOGICKY VÝZNAMNÉ LÁTKY KÔRY SMREKA OBYČAJNÉHO</p> |
| 18:45 - 19:00 | 9P14 | <p><u>Štefan Schmidt</u>, Zuzana Burčová, František Kreps, Stanislav Sekretár, Igor Šurina, Aleš Ház, Michal Jablonský
 FENOLY A POLYFENOLY V POTRAVINÁCH A ICH ANTIOXIDAČNÁ AKTIVITA A ZDRAVOTNÁ PROSPEŠNOSŤ</p> |

Sekcia 10: Chemprogress – chemické technológie

Streda, 13. september 2017

Predsedaajúci: **K. Bouzek**

- 14:00 - 14:15 10P01 Tomáš Weidlich
VLIV POUŽITÉHO UŠLECHTILÉHO KOVU VE SLITINĚ HLINÍK-KOV
NA PRŮBĚH DEHALOGENACE AROMATICKÝCH
HALOGENDERIVÁTŮ V ALKALICKÉM VODNÉM ROZTOKU
- 14:15 - 14:30 10P02 Jana Jurišová, Vladimír Danielik, Pavel Fellner, Milan Králík
KINETIKA KONVERZNEJ REAKCIE ENERGOSADROVCA
- 14:30 - 14:45 10P03 Jakub Mališ, Martin Paidar, Karel Bouzek
VLIV KRÁTKÝCH KONTROLOVANÝCH ZKRATŮ NA JEDNOTLIVÉ
FÁZE PROVOZU PEM PALIVOVÉHO ČLÁNKU
- 14:45 - 15:00 10P04 Emília Kubiňáková, Vladimír Danielik, Ján Híveš
ELEKTRICKÁ VODIVOST' NÍZKOTEPLTNÝCH KRYOLITOVÝCH
TAVENÍN
- 15:00 - 15:15 10P05 Ján Híveš, Kamil Kerekeš, Emília Kubiňáková
PROGRES V ELEKTROCHEMICKÉJ PRÍPRAVE ŽELEZANOV
- 15:15 - 15:30 10P06 Dušan Bakoš, Ida Vašková, Viera Jančovičová, Michal Čeppan
BIOTLAČ BIOSYNTETICKÝCH TUBULÁRNYCH SUBSTITUENTOV
POŠKODENEJ ĽUDSKEJ MOČOVEJ RÚRY
- 15:30 - 16:00 *Občerstvenie, Hotel Bellevue*

Sút'áž o Cenu Shimadzu

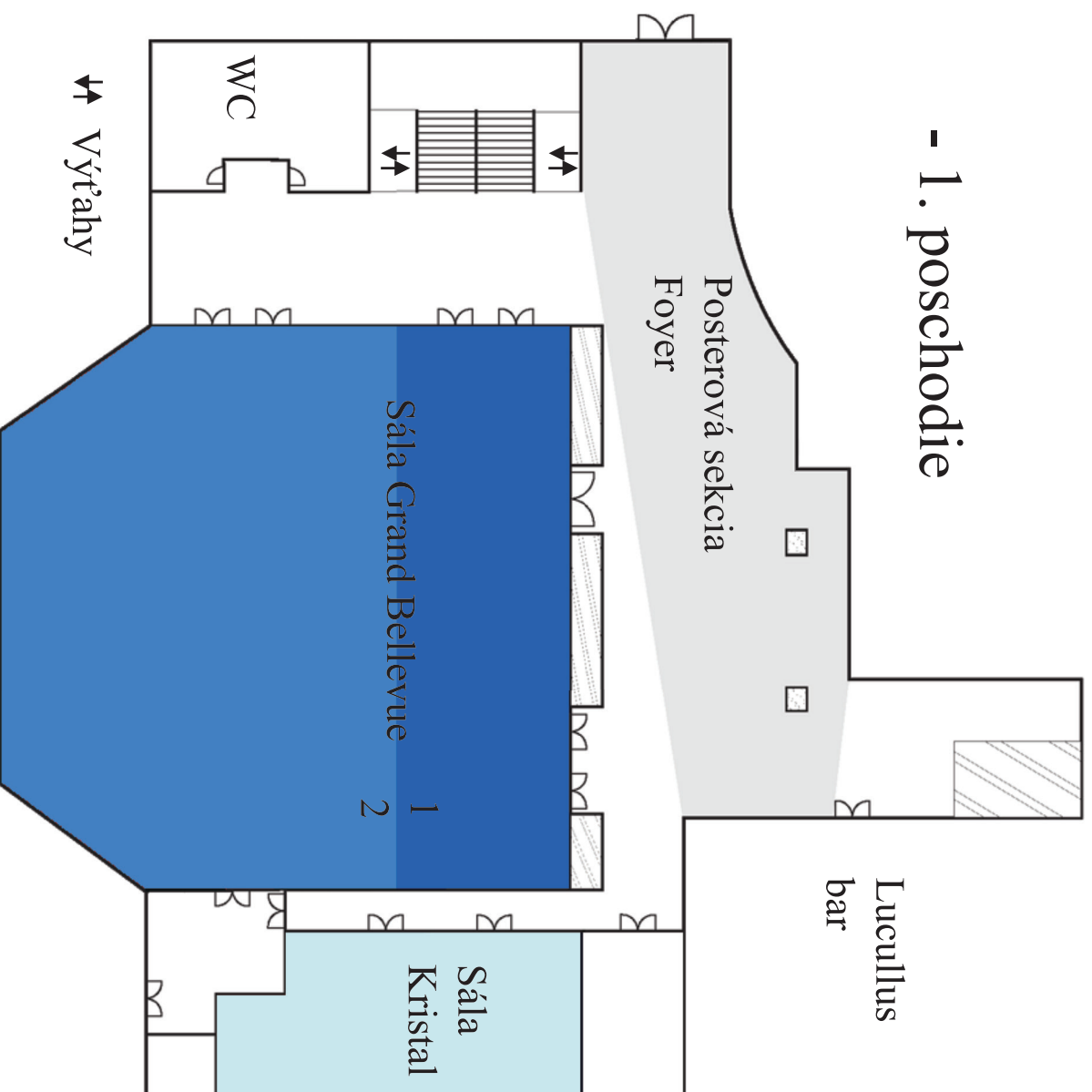
Štvrtok, 14. september 2017

Predsedaajúci: **T. Petřík**

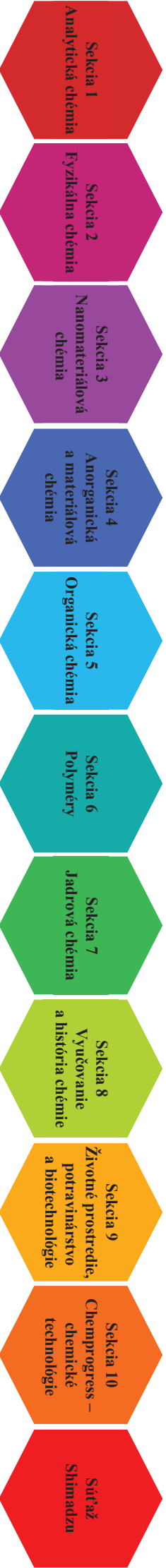
- 09:00 - 09:15 Sh01 Dmytro Baval, Hana Dejmková, Jiri Zima, Jiri Barek
UTILIZATION OF FAST SCAN DIFFERENTIAL PULSE VOLTAMMETRY AND FLOW SYSTEMS FOR DETERMINATION OF ANTIOXIDANTS
- 09:15 - 09:30 Sh02 Jana Hovancová, Ivana Šišoláková, Renáta Oriňáková, Andrej Oriňak
ELEKTROCHEMICKÉ STANOVENIE GLUKÓZY NA ZLATÝCH MIKROELEKTRÓDACH
- 09:30 - 09:45 Sh03 Jiří Hricko, Alena Zachariášová, Milena Stránská
BIOPROSPEKCE ROSTLIN *CANNABIS SATIVA*, VÝVOJ METODY METABOLOMICKÉHO FINGERPRINTINGU PRO SELEKCI ODRŮD
- 09:45 - 10:00 Sh04 Martin Ondrej, Lucie Čecháková, Ivo Fabrik, Barbora Šalovská, Aleš Tichý
FOSFOPROTEOMICKÁ ANALÝZA PROCESOV RÁDIO-SENZIBILIZÁCIE NÁDOROVEJ LÍNIE NEMALOBUNKOVÉHO KARCINÓMU PLŮC OVPLYVNENEJ INHIBÍTOROM AUTOFÁGIE LYS05
- 10:00 - 10:15 Sh05 Zuzana Pakanová, Peter Baráth, Jana Ziburová, Marek Nemčovič, Sergej Šesták, Mária Matulová, Ján Mucha
VYUŽITIE HPLC-MALDI TOF/TOF ANALÝZY DERIVATIZOVANÝCH GLYKÁNOV V DIAGNOSTIKE PORÚCH METABOLIZMU GLYKOKONJUGÁTOV
- 10:30 - 11:00 *Občerstvenie, Hotel Bellevue*
- Predsedaajúci: **T. Petřík**
- 11:00 - 11:15 Sh06 Jan Rejšek, Vladimír Vrkoslav, Josef Cvačka
AMBIENTNÍ HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIE: POVRCHOVÁ ANALÝZA OD PLANÁRNÍCH VZORKŮ K NEPLANÁRNÍM
- 11:15 - 11:30 Sh07 Pavel Škvára, Monika Radičová, Nikoleta Biherczová, Miroslava Matúšková, Erika Ďuriníková, Andrea Vojs Staňová
ANALÝZA A IDENTIFIKÁCIA 5-FLUOROCYTOZÍNU A JEHO METABOLITOV V KOMPLEXNÝCH BIOLOGICKÝCH MATRICIACH S VYUŽITÍM HPLC-HRMS
- 11:30 - 11:45 Sh08 Miroslava Zelená, Rudolf Kupčík, Pavel Řehulka, Zuzana Bílková, Lenka Česlová
SELEKTIVNÍ IZOLACE HYDROFOBINU SC3 A JEHO NÁSLEDNÁ PROTEOMICKÁ ANALÝZA
- 11:45 - 12:00 Sh09 Silvia Zichová, Dušan Palacka, Svetlana Hrouzková
VOĽBA PARAMETROV KOMBINOVANEJ QUECHERS S DISPERZNOU MIKROEXTRAKCIOU V SYSTÉME KVAPALINA-KVAPALINA (DLLME) NA IZOLÁCIU REZÍDUÍ PESTICÍDOV Z BAVLNENÝCH PRODUKTOV
- 12:30 - 14:00 *Obed, Hotel Bellevue*

Orientačný plán miestností

- 1. poschodie



Program



Utorok 12.09.2017

14:00 - 14:45	14:45 - 15:30	15:30 - 16:00	16:00	16:15	16:30	16:45	17:00	17:15	17:30	17:45	18:00	18:15	18:30 - 20:00
Bouzek PP1	Šebesta PP2	☕	Markovic	Hrubý	Rajec	Červenák	John	Dulanská	Mátl	Štríšovská	Ondrák	Tatarová	☕
			Trousil	Balzerová	Šišoláková	Fargašová	Ostigová Kráľová	Koktan	Bugárová	Lobaz			☕

Streda 13.09.2017 doobeda

09:00 - 09:45	09:45 - 10:30	10:30 - 10:50	10:50 - 11:20	11:20 - 11:45	11:45 - 12:05	12:05 - 12:30	12:30 - 14:00
Šulcová PP3	Valko PP4	☕	Goljer P1	Danková P2	Babiková P3	Noskovič P4	☕

Streda 13.09.2017 poobede

14:00	14:15	14:30	14:45	15:00	15:15	15:30 - 16:00	16:00	16:15	16:30	16:45	17:00	17:15	17:30	17:45	18:00	18:15	18:30 - 20:00
Švorc	Tomčík	Šelešovská	Schwarzová	Chvílková		☕	Novák	Hermanová	Fojta	Kolhút	Vojtyľová	Manová	Krejčová	Klepárník			☕
Bodík	Dušek	Fabián	Masťhúba			☕	Bodý	Cejpek	Ciesarová	Burčová	Kukurová	Hybenová	Sekretár				☕
Weidlich	Jurišová	Malíš	Kubínáková	Hiveš	Bakoš	☕	Barťúněk	Čtrnáctová	Ganajová	Práštilová	Reguli	Štiroľová	Čaplovíč	Uher			☕

Štvrtok 14.09.2017 doobeda

09:00	09:15	09:30	09:45	10:00	10:15	10:30 - 11:00	11:00	11:15	11:30	11:45	12:00	12:15	12:30 - 14:00
Kvittek	Petruš	Prucek	Hochvaldová	Panáček		☕	Hradlová	Čtková	Vlček	Makowska			☕
Kelnar	Špitalský	Ivaní	Kroneková	Pánek	Cifra	☕	Danko	Urbánek	Sedničková	Špírková			☕
Bavol	Hovancová	Hričko	Ondrej	Pakanová		☕	Rejšek	Škvára	Zelená	Zachová			☕

Štvrtok 14.09.2017 poobede

14:00 - 14:45	14:45 - 15:30	15:30 - 16:00	16:00	16:15	16:30	16:45	17:00	17:15	17:30	17:45	18:00	18:15	18:30	18:45
Baran PP5	Rebroš PP6	☕	Dubaj	Cibulková	Vykydalová	Noskovičová	Slušná	Rapla	Mazúr	Ortnáková	Jadlová Dyrerová	Kolarík	Kinart	Švadlák
		☕	Komadel	Vlček M.	Hill	Hannus	Poryvai	Tisovský						

Piatok 15.09.2017

09:30 - 10:15	10:15 - 10:45	10:45 - 11:45	11:45	12:00 - 14:00
Križ P5	☕	Panelová diskusia	Záver zjazdu	☕

Sekcie:

Sála Grand Bellevue plenárne prednášky

Sála Grand Bellevue 1 sekcie: 1, 2, 3

Sála Grand Bellevue 2 sekcie: 4, 5, 6, 9

Sála Krystal sekcie: 5, 7, 8, 9, 10, Shimadzu