

67. ZJAZD CHEMIKOV

Zborník abstraktov

7. – 11. september 2015
Vysoké Tatry, Horný Smokovec

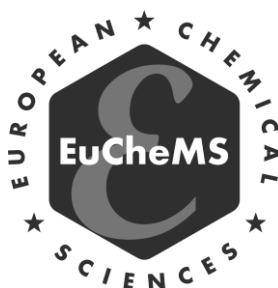
HLAVNÍ ORGANIZÁTORI

Slovenská chemická spoločnosť a Česká společnost chemická



v spolupráci s

Európskou úniou pre chemické a molekulové vedy



ORGANIZAČNÝ VÝBOR

Mária Omastová – predsedníčka
Jan John - vedecký tajomník
Sylvia Lazovská - výkonná tajomníčka
Michal Procházka, Miroslav Michalka - technický tajomníci
Zuzana Hloušková - hospodárka
Viktor Milata - vedecký tajomník

PROGRAMOVÝ VÝBOR

Doc. RNDr. Milan Drábik, PhD. (SCHS)
RNDr. Dalma Gyepesová, CSc. (SCHS)
Doc. RNDr. Marta Sališová, CSc. (SCHS)
Prof. Ing. Vlasta Brezová, DrSc. (SCHS)
Ing. Roman Karlubík, MBA (ZCHFP)
Prof. Ing. Ivan Hudec, PhD. (SSPCH)
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. Martin Bajus, DrSc. (STU, BA)
Ing. Michal Korenko, PhD. (SAV, BA)
Mgr. Martin Danko, PhD. (SAV, BA)
Prof. Ing. Stanislav Biskupič, DrSc. (STU, BA)
Doc. RNDr. Andrej Boháč, CSc. (UK, BA)
Doc. Ing. Milan Vrška, CSc. (STU, BA)
Prof. RNDr. Milan Hutta, DrSc. (UK, BA)
Doc. RNDr. Jozef Kuruc, PhD. (UK, BA)
Doc. Mgr. Radoslav Šebesta, PhD. (UK, BA)
Prof. Ing. Štefan Schmidt, PhD. (STU, BA)
Ing. Ľubomír Švorc, PhD. (STU, BA)
Prof. RNDr. Milan Melicherčík, PhD. (UMB, BB)
Ing. Ján Hirsch, DrSc. (SAV, BA)
Prof. Ing. Peter Šimon, DrSc. (STU, BA)
Prof. Ing. Vasil Koprda, DrSc. (STU, BA)
Doc. Ing. Ján Reguli, PhD. (SCHS)
Doc. RNDr. Martin Putala, PhD. (UK, BA)
Doc. RNDr. Zuzana Vargová, PhD. (UPJŠ, KE)
Doc. RNDr. Katarína Reiffová, CSc. (UPJŠ, KE)
Doc. RNDr. Renáta Oriňáková, CSc. (TU, KE)
Prof. RNDr. Nadežda Števulová, PhD. (TU, KE)
RNDr. Slávka Hamuláková, PhD. (UPJŠ, KE)
Doc. RNDr. Mária Ganajová, CSc. (UPJŠ, KE)
Doc. RNDr. Magdaléna Bálintová, PhD. (TU, KE)
Ing. Elena Kulichová (Nováky SCHS)
RNDr. Helena Vicenová (ZUCH)
RNDr. Beáta Vranovičová, PhD. (UCM, TT)

PROGRAM 67. ZJAZDU CHEMIKOV

Pondelok 7. 9. 2015

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

Utorok 8. 9. 2015

- 09:30 – 09:45 Slávnostné otvorenie zjazdu, sála Grand Bellevue
- 09:45 – 10:45 Plenárna prednáška: Jean-Marie Lehn
- 10:45 – 12:00 Príhovory hostí zjazdu, sála Grand Bellevue
- 12:00 – 14:00 Obed, hotel Bellevue
- 14:20 – 18:00 Prednášky, hotel Bellevue
- 18:00 – 20:00 Večera, hotel Bellevue
- 19:00 – 21:00 Valné zhromaždenie SCHS, hotel Bellevue
- 20:00 – 23:00 Posterovy a vínný večer, hotel Bellevue

Streda 9. 9. 2015

- 09:00 – 12:00 Prednášky, hotel Bellevue
- 12:00 – 13:30 Obed, hotel Bellevue
- 13:30 – 18:00 Výlety
- 18:00 – 20:00 Večera, hotel Bellevue
- 20:00 – 23:00 Postery a pivný večer, hotel Bellevue

Štvrtok 10. 9. 2015

- 09:00 – 12:25 Prednášky, hotel Bellevue
- 12:30 – 14:00 Obed, hotel Bellevue
- 14:20 – 17:45 Prednášky, hotel Bellevue
- 19:00 – 23:59 Slávnostný večierok s vyhodnotením posterovej súťaže, hotel Bellevue

Piatok 11. 9. 2015

- 09:00 – 10:15 Prednášky, hotel Bellevue
- 10:45 – 12:00 Panelová diskusia ako záver zjazdu
- 12:00 – 14:00 Obed, hotel Bellevue

SEKCIE ZJAZDU A GARANTI

1. **Analytická a fyzikálna chémia**
Doc. Ing. Ľubomír Švorc, PhD.
2. **Anorganická a materiálová chémia**
Doc. Ing. Ján Moncol', PhD.
3. **Organická chémia a polyméry**
Mgr. Martin Danko, PhD.
4. **Vyučovanie a história chémie**
Doc. Ing. Ján Reguli, CSc.
5. **Potravinárstvo, životné prostredie a biotechnológia**
Prof. Ing. Štefan Schmidt, CSc.
6. **CHEMPROGRESS**
Prof. Ing. Martin Bajus, DrSc.

Garant súťaže posterov

Doc. RNDr. Milan Drábik CSc.

PLENÁRNA PREDNÁŠKA

PLP **Jean-Marie Lehn** Perspectives in Chemistry: From Supramolecular Chemistry
Towards Adaptive Chemistry

ZOZNAM POZVANÝCH PREDNÁŠOK

- | | | |
|-----|-----------------------------|---|
| PP1 | Ján Tkáč | Aplikácia nanomateriálov a imobilizácie kontrolovanej v nanoškále pri príprave ultracitlivých biosenzorov a biopalivových článkov |
| PP2 | Jiří Pospíšil | Vývoj nových syntetických postupů a jejich aplikace při syntéze přírodních látek |
| PP3 | Ľubomír Švorc | Využitie netradičných elektródových materiálov vo farmaceutickej a klinickej analýze |
| PP4 | Daniela Šmogrovičová | Pivo a zdravie – od mýtov k vede |
| PP5 | Jozef Čársky | 200 rokov od smrti A. Ruprechta |
| PP6 | Ján Imrich | Nové proflavíny a spirocykly akridínu ako sľubné dna-interkalátory a antitumorové látky |
| PP7 | Ján Moncol' | 100 rokov chemickej kryštalografie a perspektívy |
| PP8 | Elena Hájeková | Recyklácia polymérnych odpadov |

OBSAH ZOZNAM PREDNÁŠOK A POSTEROV PODĽA SEKCIÍ

Plenárna prednáška 59

PERSPECTIVES IN CHEMISTRY: FROM SUPRAMOLECULAR CHEMISTRY TOWARDS ADAPTIVE CHEMISTRY Jean-Marie LEHN.....	59
--	----

Pozvané prednášky 59

PP1 APPLICATION OF NANOMATERIALS AND NANOSCALE-CONTROLLED IMMOBILIZATION FOR PREPARATION OF ULTRASENSITIVE BIOSENSORS AND BIOFUEL CELLS <u>Jan Tkáč</u> , Tomáš Bertók, J. Filip, Ľudmila Kluková, András Hushegyi, Dominika Pihíková, Štefan Belický.....	59
PP2 VÝVOJ NOVÝCH SYNTETICKÝCH POSTUPU A JEJICH APLIKACE PRI SYNTÉZE PRÍRODNÝCH LÁTEK Jiří Pospíšil	60
PP3 VYUŽITIE NETRADIČNÝCH ELEKTRODOVÝCH MATERIÁLOV VO FARMACEUTICKEJ A KLINICKEJ ANALÝZE Ľubomír Švorc.....	60
PP4 PIVO A ZDRAVIE – OD MÝTOV K VEDE Daniela Šmogrovičová	61
PP5 NOVÉ PROFLAVÍNY A SPIROCYKLY AKRIDÍNU AKO SLUBNÉ DNA- INTERKALÁTORY A ANTITUMOROVÉ LÁTKY Ján Imrich	61
PP6 ANTON LEOPOLD RUPRECHT – VÝZNAČNÁ OSOBNOSŤ CHEMICKEJ REVOLÚCIE V 18. STOROČÍ Jozef Čársky	62
PP7 RECYKLÁCIA POLYMÉRNÝCH ODPADOV <u>Elena Hájeková</u> , Martin Bajus	62
PP8 100 ROKOV CHEMICKEJ KRYŠTALOGRAFIE A PERSPEKTÍVY Ján Moncol'	63

Prednášky - Sekcia 1: Analytická a fyzikálna chémia..... 64

1P01 CHOVÁNÍ DNA OLIGONUKLEOTIDŮ TVOŘÍCÍCH G-KVADRUPLY NA ELEKTRICKY NABITÝCH POVRŠÍCH RTUŤOVÝCH A UHLÍKOVÝCH ELEKTROD <u>Miroslav Fojta</u> , Pavlína Vidláková, Hana Pivoňková, Iva Kejnovská, Libuše Trnková, Michaela Vorlíčková, Luděk Havran	64
---	----

1P02 NEW APPROACHES IN THE DEVELOPMENT OF NOVEL ELECTROCHEMICAL (BIO)SENSORS Vlastimil Vyskočil	64
1P03 VÝVOJ A APLIKÁCIA DNA BIOSENZORA ZALOŽENÉHO NA VYUŽITÍ BÓROM DOPOVANEJ DIAMANTOVEJ ELEKTRODY V OBLASTI FARMACEUTICKEJ ANALÝZY Jana Svítková, Silvia Švikruhová, Ľubomír Švorc	65
1P04 GEOCHEMICAL CHARACTERIZATION OF AUSTRALASIAN TEKTITES IN SEARCH OF THEIR SOURCE MATERIALS AND PARENT CRATER Jiří Mizera, Zdeněk Řanda, Jan Kameník	65
1P05 HYBRIDNÍ MAGNETICKÉ NANOČÁSTICE PRO KOMPLEXACE AROMATICKÝCH LÁTEK Jakub Koktan, Ondřej Kaman, Klára Řezanková, Helena Sedláčková, Michal Řezanka, Jarmila Kuličková a Pavel Řezanka	66
1P06 MĚDĚNÁ AMALGÁMOVÁ ELEKTRODA JAKO CITLIVÝ VOLTAMETRICKÝ SENZOR PRO STANOVENÍ CHEMOTERAPEUTICKÉHO LÉČIVA 5-FLUOROURACILU Renáta Šelešovská, Lenka Janíková, Michaela Štěpánková, Jaromíra Chýlková	66
1P07 VOLTAMETRICKÉ STANOVENÍ VYBRANÝCH ANTIOXIDANTŮ V ROPNÝCH PRODUKTECH Markéta Tomášková, Jaromíra Chýlková, Tomáš Navrátil, Renáta Šelešovská	67
1P08 STANOVENIE BIOGENNÝCH AMÍNŮV V POTRAVINÁCH Jozef Sokol, Zuzana Dičáková	67
1P09 MONITORING OF GRAPE WINE PRODUCTION BY NMR SPECTROSCOPY Milan Mazúr, Katarína Furdíková, Michal. Kaliňák, Marián Valko	69
1P10 IZOLACE MONONUKLEÁRNÍCH BUNĚK Z PERIFERNÍ KRVE A JEJICH DETEKCE PRŮTOKOVOU CYTOMETRIÍ U PACIENTŮ PO BARIATRICKÝCH OPERACÍCH. Karolína Křenková, Michal Haluzík, Alexandra Lochmanová, Marek Bužga	70
1P11 VISCOSITY COEFFICIENTS B OF KCL, NaCl, NaI, NaBr, KNO ₃ , LiNO ₃ , AgNO ₃ , NaClO ₄ , NaBPh ₄ , Bu ₄ Ni AND Et ₄ Ni IN RICH OF WATER BINARY MIXTURES CONTAINING PROPAN-1-OL AT 298.15 K Zdzisław Kinart, Adam Bald	70
1P12 STANOVENÍ PROSTATICKEHO SPECIFICKÉHO MEMBRÁNOVÉHO ANTIGENU (PSMA) POMOCÍ KOMBINACE NANOKOMPOZITU Fe ₃ O ₄ @AG A MAGNETICKY ASISTOVANÉ POVRCHOVĚ ZESÍLENÉ RAMANOVY SPEKTROSKOPIE Zuzana Chaloupková, Zdeňka Marková, Václav Ranc, Radek Zbořil	71
1P13 DETEKCE BAKTERIÍ V KLOUBNÍCH PUNKTÁTECH METODOU POVRCHEM ZESÍLENÉ RAMANOVY SPEKTROSKOPIE Ariana Fargašová, Robert Prucek, Václav Ranc, Klára Černá	71
1P14 M/CNTS KATALYZÁTORY PRE OPTIMALIZÁCIU PYROLÝZNEJ KONVERZIE METÁNU NA VODÍK. Branislav Erdelyi, Renáta Oriňáková, Andrej Oriňák, Dušan Velič, Vladimír Girman	72

1P15 INHIBÍCIA PROLIFERÁCIE BUNIEK NA NANOOBJEKTOVOM HYBRIDNOM SUBSTRÁTE <u>Ján Macko</u> , Renáta Oriňáková, Andrej Oriňák, Jana Vargová, Denisa Harvanová, Jozef Radoňák	72
1P16 NANOFORMULACE RIFAMPICINU V LÉČBĚ MULTIREZISTENTNÍ TUBERKULÓZY: PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE <u>Jiří Trousil</u> , Sergey Filippov, Martin Hrubý, Bedřich Porsch, Petr Štěpánek	73
1P17 OXIDACE FLAVONOLIGNANŮ A JEJICH INTERAKCE S DNA A PROTEINY <u>Martina Zatloukalová</u> , Michaela Pyszková, Vladimír Křen, Jitka Ulrichová, Jan Vacek.....	73
1P18 ELEKTROCHEMICKÁ MODIFIKÁCIA TLAČENÝCH UHLÍKOVÝCH ELEKTROD FUNKČNÝMI KOVOVÝMI NANOČASTICAMI <u>Lenka Škantárová</u> , Renáta Oriňáková, Andrej Oriňák	73
Prednášky - Sekcia 2: Anorganická a materiálová chémia 74	
2P01 KORÓZNE VLASTNOSTI HEXAHYDRÁTU DUSIČNANU HOREČNATÉHO <u>Vladimír Danielik</u> , Peter Šoška, Jana Jurišová	74
2P02 VYUŽITÍ KOMPOZITU NA BÁZI REDUKOVANÉHO GRAFEN OXIDU A ZLATÝCH NANOČÁSTIC PRO SUZUKI REAKCE A OXIDATIVNÍ ESTERIFIKACE <u>Radka Králová</u> , Anuj K. Rath, Manoj B. Gawande, K.K.R. Datta, Václav Ranc, Rajender S. Varma, Libor Kvítek, Radek Zbořil	75
2P03 APLIKACE NANOČÁSTIC V AKTIVNÍCH OBALOVÝCH FOLIÍCH <u>Libor Kvítek</u> , Aleš Panáček, Robert Pucek, Libor Machala, Michal Křížek, Jiří Pechoušek, Alice Tesaříková Svobodová, Dagmar Měřínská	75
2P04 ZVÝŠENÍ ANTIBAKTERIÁLNÍ AKTIVITY ANTIBIOTIK KOMBINACÍ S NANOČÁSTICEMI STŘÍBRA VŮČI MULTIREZISTENTNÍM BAKTERIÍM <u>Aleš Panáček</u> , Monika Smékalová, Renata Večeřová, Milan Kolář, Robert Pucek, Libor Kvítek a Radek Zbořil	76
2P05 VLIV UHLIČITANŮ OBSAŽENÝCH V SORPČNÍCH MATERIÁLECH PŘI SORPCI TĚŽKÝCH KOVŮ Martin Mucha	77
2P06 ODSTRANĚNÍ ARSENU Z VODNÉHO PROSTŘEDÍ POMOCÍ ŽELAZANŮ <u>Robert Pucek</u> , Jan Kolařík, Jiří Tuček, Rajender S. Varma, Virender K. Sharma, Radek Zbořil	77
2P07 ODSTRANĚNÍ KOVŮ Z VODNÉHO PROSTŘEDÍ POMOCÍ FERÁTU(VI): STUDIUM KINETIKY A MECHANISMU. <u>Jan Kolařík</u> , Robert Pucek, Jiří Tuček, Ivana Hušková, Jan Filip, Virender K. Sharma, Radek Zbořil ..	78
2P08 STRUCTURAL STUDY AND CATALYTIC ACTIVITY OF NEW MN(III) AND FE(III) DIPICOLINATE COMPLEXES <u>M. Koman</u> , R. Uhrecký, J. Moncol, J. Derco	78
2P09 SYNTHESIS, STRUCTURAL AND MAGNETOCHEMICAL STUDY OF THE IRON(III) SCHIFF BASE COMPOUNDS <u>Petra Masárová</u> , Ivan Šalitroš, Milan Gembický, Ján Moncol, Ivan Nemec	79

2P10 ŠTVORJADROVÉ KOMPLEXY NI(II) S MOTÍVOM KUBÁNOVÉHO A NEÚPLNÉHO DIKUBÁNOVÉHO JADRA <u>Marek Machata</u> , Ivan Nemec, Radovan Herchel, Zdeněk Trávníček	79
2P11 SOLI A KOMPLEXY GUANIDINIA – STÁLE ATRAKTIVNÍ MATERIÁLY PRO NELINEÁRNÍ OPTIKU <u>Ivan Němec</u> , Zorka Macháčková, Irena Matulková, Ivana Císařová, Petr Němec	80
2P12 ÚLOHA VODÍKOVÉ VAZBY PŘI PROTONOVÉ VODIVOSTI KRYSTALICKÝCH LÁTEK; MĚŘENÍ NA PRÁŠKOVÝCH VZORCÍCH <u>David Havlíček</u> , Jiří Plocek, Lukáš Taraba	81
2P13 KOORDINAČNÍ VLASTNOSTI FENYL-TRIS(1,2,4-DIAZAFOSFOLYL)BORÁTOVÉHO LIGANDU <u>Martin Mlateček</u> , Jan Honzíček, Libor Dostál, Zdeňka Růžicková a Milan Erben	81
Prednášky - sekcia 3: Organická chémia a polyméry..... 82	
3P01 POLYMERY A RADIONUKLIDY – CO TATO KOMBINACE MŮŽE PŘINĚST PRO RADIOFARMACEUTICKÉ APLIKACE? <u>Martin Hrubý</u> , Jan Kučka, Ondřej Sedláček, Miroslav Vetrík, Aneta Pospíšilová, Pavel Švec	82
3P02 STUDY OF PHOTOCHEMICALLY INDUCED ATOM TRANSFER RADICAL POLYMERIZATION OF (METH)ACRYLATES IN THE PRESENCE OF OXYGEN <u>Katarína Borská</u> , Daniela Moravčíková, Anita Eckstein-Andicsová, Jaroslav Mosnáček.....	83
3P03 ANAEROBNÍ DEGRADACE POLYESTERAMIDOVÝCH VLÁKENNÝCH VRSTEV <u>Lenka Malinová</u> , Jiří Brožek, Pavla Káchová, Pavla Šmejkalová	83
3P04 ELECTRODES DECORATED BY METAL NANOPARTICLES FOR SENSING APPLICATION <u>Jaroslav Kuliček</u> , Matej Mičušík, Vitali Scherbahn, Vladimír M. Mirsky, Mária Omastová.....	84
3P05 MIKROFIBRILÁRNÍ KOMPOZITY: MOŽNOSTI JEJICH ZLEPŠENÍ APLIKACÍ NANOPLNIV <u>Ivan Kelnar</u> , Ludmila Kaprálková	84
3P06 OLIGOTIOFÉNOVÉ DERIVÁTY PRE APLIKÁCIE V ORGANICKEJ ELEKTRONIKE Martin Putala	85
3P07 VYUŽITÍ INTRAMOLEKULÁRNÍ N-ARYLACE PRO SYNTÉZU TRICYKlickÝCH SLOUČENIN OBSAHUJÍCÍCH 1,4-DIHYDROCHINOLINOVÝ SKELET <u>Břetislav Brož</u> , Petr Šimůnek	85
3P08 TRANSFORMACE EZETIMIBU V BAZICKÉM PROSTŘEDÍ <u>Jiří Hanusek</u> , Jana Baťová	86
3P09 SPIROCYKLIZAČNÉ REAKCIE INDOLOVÉHO FYTOALEXÍNU BRASINÍNU A JEHO DERIVÁTOV Mariana Budovská	86

3P10 PUSH-PULL DERIVÁTY PYRAZINU JAKO EFEKTIVNÍ FOTOREDOX KATALYZÁTORY Filip Bureš	87
3P11 STEREOSELEKTIVITA PD-CYKLIZÁCIÍ V DOMINO REAKCIÁCH <u>Angelika Lásiková</u> , Jana Doháňošová, Tibor Gracza	88
3P12 KATALÝZA MĚDNÝMI KOMPLEXY V POST-ULLMANNOVĚ DOBĚ <u>Pavel Pazdera</u> , Nitin Kore, Dana Herová	88
3P13 STEREOSELEKTIVNA SYNTÉZA 1-DEOXYSFINGOIDNÝCH BÁZ <u>Kvetoslava Pomikalová</u> , Miroslava Martinková, Zuzana Švajleninová, Jozef Gonda	89
3P14 IMOBILIZOVANÉ MĚDNATÉ KOMPLEXY – RECYKLOVATELNÉ ENANTIOSELEKTIVNÍ KATALYZÁTORY PRO HENRYHO REAKCI <u>Miloš Sedlák</u> , Jiří Hanusek, Pavel Drabina	89
3P15 VYUŽITÍ POLYMERNÍCH DONORŮ OXIDU DUSNATÉHO PRO ZVÝŠENÍ AKUMULACE CYTOSTATIK A IMUNOMODULÁTORŮ V MIKROPROSTŘEDÍ PEVNÝCH NÁDORŮ <u>Martin Studenovský</u> , Milada Šírová,	90
3P16 GRAFÉN – POLYMÉRNE NANOKOMPOZITY NA POVRCHOVÚ ÚPRAVU TEXTÍLIÍ Zdeno Špitalský	91
3P17 TULIPS AS A SOURCE OF MONOMER FOR SUPERABSORBENT HYDROGELS <u>Daniela Moravčíková</u> , Jozef Kollár, Miroslav Mrlík, Zuzana Kroneková, Igor Lacík, Jaroslav Mosnáček.....	91
3P18 SYNTÉZA POLYMERNÍCH KONJUGÁTŮ LIGANDŮ MUSKARINOVÉHO RECEPTORU PRO ONKOLOGICKOU DIAGNOSTIKU A TERAPII <u>Aneta Pospíšilová</u> , Ondřej Sedláček, Martin Hrubý, Markéta Jirátová	92
3P19 PRÍPRAVA HYPERVETVENÝCH POLY(ESTERAMIDOV) A POLY(ÉTERAMIDOV) AKO MAKROINICIÁTOROV PRE KATIÓNOVÚ POLYMERIZÁCIU 2- OXAZOLÍNŮV <u>Petra Šrámková</u> , Juraj Kronek	92
3P20 MONOSTABLE PHOTOSWITCHES BASED ON HYDRAZONE-ANION INTERACTION <u>Miroslav Horváth</u> , Marek Cigán, Martin Gáplovský, Klaudia Jakusová, Jana Donovalová, Anton Gáplovský	93
3P21 PRÍPRAVA POTENCIÁLNYCH INHIBÍTOROV GLYKOZYLTRANSFERÁZ – SYNTÉZA MIMETÍK TS <u>Marek Baráth</u> , Miroslav Kooš, Chun Hung Lin, Igor Tvaroška, Ján Hirsch	93
3P22 OD ŠAMANOV K NARKOMANOM. ŠTRUKTÚRA, SYNTÉZA, VLASTNOSTI A ÚČINKY PRÍRODNÝCH A SYNTETICKÝCH DROG. Miroslav Kríž.....	94

Prednášky - sekcia 4: Vyučovanie a história chémie 95

4P01 VÝUKA CHEMIE – SOUČASNOST A PERSPEKTIVA Hana Čtrnáctová	95
4P02 EFEKTÍVNOSTĚ BĚDATEĚSKY ORIENTOVANEJ VÝUČBY Mária Ganajová, Ivana Sotáková.....	95
4P03 PŘÍNOS UPY A IRER K PODPOŘE VZDĚĚÁVÁNÍ A POZNÁVÁNÍ ŽÁKŮ I VEŘEJNOSTI V OBLASTI CHEMIE Patrik Pařík	96
4P04 ZA CHEMIÍ DO PŘÍRODOVĚDNĚ LABORATOŘE PEVNOSTI POZNÁNÍ Jana Prášilová, Pavlína Ginterová	96
4P05 10 ROKOV SPOTREBITEĚSKEJ CHĚMIE V PŘÍPRAVE UČITEĚOV CHĚMIE Ján Reguli	96
4P06 HISTÓRIA POTRAVINÁRSKEHO PRIEMYSLU NA SLOVENSKU Michal Uher, Ľudovít Hallon, Kamil Cejpek, Viktor Milata.....	97
4P07 HISTÓRIA SPRACOVANIA KOŽÍ A GARBIARSKY PRIEMYSEL NA SLOVENSKU Branislav Krasnovský, Michal Uher, Miroslav Sabol, Viktor Milata.....	98
4P08 VÝZNAMNÁ VÝROČÍ POUŽITÍ CHEMICKÝCH ZBRANÍ Zdeněk Šafařík, Dušan Vičar, Ivan Mašek, Ivan Princ.....	98
4P09 COOPERATION IN EDUCATION AND TRAINING IN NUCLEAR- AND RADIOCHEMISTRY IN EUROPE J. John	99

Prednášky - sekcia 5 Potravinárstvo, životné prostredie a biotechnológia..... 100

5P01 ŠPECIÁLNE PRODUKTY Z FYTOMASY Stanislav Sekretár, Lenka Tmáková, Štefan Schmidt, František Kreps, Zuzana Burčová.....	100
5P02 BIOACTIVE CARBOHYDRATES FROM FUNGI <i>ALTERNARIA BRASSICICOLA</i> AND <i>LEPTOSPHAERIA MACULANS</i> , PATHOGENS OF OILSEED RAPE (<i>BRASSICA NAPUS</i>) Roman Bleha, Jan Pravda, Barbora Jindřichová, Lenka Burketová, Andriy Synytsya, Olga Valentová.....	100
5P03 STANOVENÍ ANTIOXIDAČNÍ AKTIVITY LUTEINU Barbora Hrvolová, Lenka Portychová, Dana Vaněrková, Jiří Kalina	101
5P04 OXIDÁCIA TOKOFEROLOV V OLEJOCH VYSTAVENÝCH FRITOVACÍM TEPLOTÁM Zuzana Burčová, František Kreps, Štefan Schmidt Stanislav Sekretár	101
5P05 VPLYV VYSOKOTEPLOTNÉHO OHREVVU RASTLINNÝCH OLEJOV NA DEGRADÁCIU TOKOFEROLOV František Kreps, Zuzana Burčová, Štefan Schmidt Stanislav Sekretár	102

5P06 ODSTRANĚNÍ VYBRANÝCH NESTEROIDNÍCH ANTIREVMATIK POMOCÍ HETEROGENNÍ FOTOKATALÝZY <u>Vojtěch Trousil</u> , Zuzana Blažková, Eva Slehová, Jiří Palarčík, Oldřich Machalický, Jiří Cakl	102
5P07 VLIV VYBRANÝCH TĚŽKÝCH KOVŮ NA RŮST <i>ACIDITHIOBACILLUS</i> <i>FERROOXIDANS</i> <u>Eva Slehová</u> , Zuzana Blažková, Miloslav Slezák, Jiří Palarčík	103
5P08 ZVYŠOVÁNÍ EFEKTIVITY ODBOURÁVÁNÍ FOSFORU U DČOV <u>Libor Dušek</u> , Veronika Kočanová	103
5P09 AUTOTROFNÍ DENITRIFIKACE BAKTERIÍ <i>THIOBACILLUS DENITRIFICANS</i> PODPOROVANÁ FOSFOREM A MOLYBDENEM <u>Zuzana Blažková</u> , Eva Slehová, Vojtěch Trousil, Jiří Palarčík, Miloslav Slezák, Jiří Cakl	104
5P010 CYTOTOXICKÉ ÚČINKY NANOČÁSTIC STŘÍBRA A ZLATA NA MYŠÍ FIBROBLASTY <u>Šárka Hradilová</u> , Aleš Panáček, Radek Zbořil	104
5P11 ODSTRANĚNÍ CHROMU(VI) Z ROZTOKU POMOCÍ STRUSEK <u>Lenka Bláhová</u> , Zuzana Navrátilová	105
5P12 PLODY RAKYTNÍKA REŠETLIAKOVÉHO VO VÝŽIVĚ A ZDRAVÍ ČLOVEKA <u>Štefan Schmidt</u> , Zuzana Burčová, Stanislav Sekretár, František Kreps, Milan Čertík	105

Prednášky - sekcia 6 CHEMPROGRESS..... 106

6P01 PEM ELEKTROLÝZA VODY – ASPEKTY SPOJENÉ S OPTIMALIZACÍ ANODY <u>Karel Bouzek</u> , Jakub Polonský, Tomáš Bystroň	106
6P02 DISTRIBUCE PROUDU V PILOTNÍ ELEKTRODIALÝZNÍ JEDNOTCE – VLIV PRŮTOČNÉHO USPOŘÁDÁNÍ A NESYMETRIE PROVOZNÍCH PODMÍNEK VSTUPNÍCH ROZTOKŮ <u>Michal Němeček</u> , Roman Kodým, Karel Bouzek, Dalimil Šnita	106
6P03 ANALÝZA ROVNOMĚRNOSTI TOKU HMOTY A NÁBOJE VE SVAZKU VYSOKOTEPLTNÍHO PALIVOVÉHO ČLÁNKU TYPU PEM POMOCÍ MATEMATICKÉHO MODELU <u>Monika Drakselová</u> , Roman Kodým, Dalimil Šnita, Karel Bouzek	107
6P04 PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE VODÍKOVOU ELEKTRODOU NESENÝCH ČLÁNKŮ PRO PROCES VYSOKOTEPLTNÍ ELEKTROLÝZY VODY <u>Filip Karas</u> , Martin Paidar, Karel Bouzek	107
6P05 ALKALICKÁ ELEKTROLÝZA VODY VYUŽÍVAJÍCÍ ANION SELEKTIVNÍ POLYMERNÍ MATERIÁLY OBSAHUJÍCÍ DABCO FUNKČNÍ SKUPINY <u>Jaromír Hnát</u> , Jan Žitka, Martin Paidar, Karel Bouzek	108
6P06 THIN-FILM METHOD FOR HIGH TEMPERATURE PEM FUEL CELL CATALYST CHARACTERIZATION <u>Martin Prokop</u> , Adam Giurg, Tomáš Bystroň, Martin Paidar, Karel Bouzek	108

6P07 PERMEACE VODÍKU MEMBRÁNOU NAFION® 117 PŘI PEM ELEKTROLÝZE VODY <u>Jakub Mališ</u> , Martin Paidar, Karel Bouzek.....	109
--	-----

6P08 VYUŽITÍ IONTOVÉ VÝMĚNY PRO ODSTRAŇOVÁNÍ KYSELÝCH BARVIV Z ODPADNÍCH VOD <u>Tomáš Weidlich</u> , Jana Martinková, Miroslav Šimek.....	109
---	-----

Postery - sekcia 1 Analytická a fyzikálna chémia 110

1Po01 SENZOR NA BÁZI ZLATÝCH NANOČÁSTIC K IN VIVO DETEKCI DNA A JEJÍHO POŠKOZENÍ POMOCÍ POVRCHEM ZESÍLENÉ RAMANOVY SPEKTROSKOPIE. <u>Anna Balzerová</u> , Markéta Havrdová, Václav Ranc	110
---	-----

1Po02 VÝVOJ METODY PRO MONITOROVÁNÍ TRYPTOFANU A JEHO METABOLITŮ V BIOLOGICKÝCH MATRICÍCH JEDINCŮ S IMUNITNÍ DYSREGULACÍ A LATENTNÍ FORMOU TOXOPLAZMÓZY <u>Lukáš Filip</u> , Jana Vondroušová, Kamila Syslová, Petr Kačer	110
--	-----

1Po03 VOTAMMETRIC DETERMINATION OF HOMOVANILLIC ACID AND VANILLYLMANDELIC ACID ON CARBON INK SCREEN-PRINTED ELECTRODE <u>Jan Fischer</u> , Evangelia Ktena, Anastasios Economou, Jiří Barek.....	111
--	-----

1Po04 STANOVENÍ KYSELINY ACETYLSALICYLOVÉ VE VYBRANÝCH LÉKOVÝCH FORMÁCH TECHNIKOU SEKVENČNÍ INJEKČNÍ ANALÝZY Hana Krátká, <u>Jakub Hraniček</u>	111
---	-----

1Po05 NMR AND DFT ANALYSIS OF 3D STRUCTURE AND SPIN-SPIN COUPLING CONSTANTS IN HEPARIN TRISACCHARIDE. Miloš Hricovini, P.-Alexandre Driguez, Olga L. Malkina	112
--	-----

1Po06 STANOVENÍ ANTIBIOTIKA CEFTAZIDIMU A AMPICILINU V PERFUZÁTU Z MIKRODIALYZAČNÍ SONDY <u>Martin Jaček</u> , Jan Polák, Radka Straková, Eva Samcová, Petr Tůma	112
--	-----

1Po07 CONDUCTOMETRIC STUDIES OF FORMATION OF COMPLEXES 15-CROWN-5 ETHER WITH NAI, NABR AND NA CL IN H ₂ O - PROPAN-1-OL MIXTURES AT 298.15 K. Zdzisław Kinart, Adam Bald,	113
---	-----

1Po08 METAL-ORGANIC FRAMEWORKS AS MATRICES FOR MASS SPECTROMETRY OF BIOMOLECULES <u>Lenka Kolářová</u> , Kristina Hajtmanová, Lukáš Kučera, Petr Vaňhara, Eladia María Peña-Méndez, Jose Elias Conde, Aleš Hampl, and Josef Havel	113
--	-----

1Po09 VYUŽITIE MIKROEXTRAKČNÝCH TECHNÍK PRE STANOVENIE ENDOGÉNNYCH ESTROGÉNOV V MOČI <u>Elena Kupcová</u> , Katarína Reiffová	114
---	-----

1Po10 ANALÝZA ALKALOIDŮ V MAKOVINĚ METODOU VYSOKOÚČINNÉ KAPALINOVÉ CHROMATOGRFIE <u>Aneta Laryšová</u> , Lenka Endlová, Viktor Vrbovský, Zuzana Navrátilová	114
---	-----

1Po11 INFLUENCE OF FREEZE-DRYING ON THE NATIVE HYALURONAN REACTIVITY STUDIED BY FLUORESCENCE TECHNIQUES <u>Petra Michalicová</u> , Miloslav Pekař, Filip Mravec	115
1Po12 SNÍŽENÍ RADIAČNÍ CITLIVOSTI MIKROORGANIZMŮ POMOCÍ VYCHYTÁVAČŮ OH RADIKÁLŮ PŘI RŮZNÝCH DÁVKOVÝCH RYCHLOSTECH ZÁŘENÍ GAMA Barbora Neužilová a Viliam Múčka	115
1Po13 ÚČINNÉ PRIEREZY DVOJFOTÓNOVEJ ABSORPCIE PERSPEKTÍVNYCH ZLÚČENÍN NA BÁZE DERIVÁTOV BENZOTIAZOLU <u>Eva Noskovičová</u> , Dušan Lorenc, Ivica Sigmundová , Peter Magdolen , Pavol Záhradník , Dušan Velič	116
1Po14 STUDY OF ELECTROCHEMICAL BEHAVIOR OF DASATINIB USING HANGING MERCURY DROP ELECTRODE AND GOLD DISC ELECTRODE <u>Kateřina Nováková</u> , Tomáš Navrátil, Jana Jaklová Dytrtová, Michal Jakl	116
1Po15 DETERMINATION OF REBAUDIOSIDE A AND STEVIOSIDE IN FOOD SUPPLEMENTS AND BEVERAGES BY CAPILLARY ELECTROPHORESIS WITH CONTACTLESS CONDUCTIVITY DETECTION <u>Václav Pavlíček</u> , Petr Tůma and Eva Samcová	117
1Po16 DUÁLNÍ CHEMOSENZOR PRO STANOVENÍ BIOLOGICKY VÝZNAMNÝCH MOLEKUL <u>Blanka Pelikánová</u> , Michal Šídlo, Marek Pernica, Přemysl Lubal	117
1Po17 DEGRADÁCIA CHOLESTEROLU NA FOTOKATALYZÁTORE – OXIDE TITANIČITOM <u>Michal Procházka</u> , Dušan Velič	118
1Po18 VÝVOJ RÝCHLYCH ANALYTICKÝCH METÓD NA STANOVENIE MEDI U PACIENTOV TRPIACICH WILSONOVOU CHOROBOU <u>Simona PROCHÁZKOVÁ</u> , Peter BOŽEK a Radoslav HALKO	118
1Po19 DETERMINATION OF SELENIUM BY UV-PHOTOCHEMICAL VAPOUR GENERATION COUPLED WITH GRAPHITE FURNACE ATOMIC ABSORPTION SPECTROMETRY <u>Marcela Rybínová</u> , Václav Červený, Petr Rychlovský.....	119
1Po20 INTERAKCE AROMATICKÝCH SLOUČENIN SE ZLATÝMI NANOČÁSTICEMI MODIFIKOVANÝMI CYKLODEXTRINÝ <u>Helena Sedláčková</u> , Jakub Koktan, Klára Řezanková, Michal Řezanka a Pavel Řezanka	119
1Po21 FORENZNÉ VYUŽITIE MATRICOVÉHO EFEKTU V HMOTNOSTNEJ SPEKTROMETRII SEKUNDÁRNYCH IÓNOV PRI ŠTÚDIU POVÝSTRELOVÝCH SPODÍN A MODELOVÉHO SYSTÉMU OLOVNATÉ SOLI/FULLERÉNY <u>Lenka Slušná</u> , Soňa Halászová, Michal Procházka, Dušan Velič.....	120
1Po22 BROADBAND THZ SPECTROSCOPY OF CYCLIC OLEFIN COPOLYMER MATERIALS FOR NONLINEAR THZ WAVEMIXING <u>Lenka Slušná</u> , Eva Noskovičová, Dušan Lorenc, Eduard Jáné, Vojtech Szocs and Dušan Velič	120

1Po23 AUTOMATED ON-LINE MONITORING OF LONG-TERM PROCESSES USING SEQUENTIAL INJECTION ANALYSIS <u>Petr Solich</u> , Hana Sklenářová	121
1Po24 NEW INSIGHT INTO MIXED LIPOSOMAL SYSTEM <u>Jana Szewieczková</u> , Irena Türkeová, Filip Mravec, Miloslav Pekař	121
1Po25 OPTIMALIZACE METODY STANOVENÍ AKTIVITY PANKREATICKÉ LIPÁZY <u>Šárka Štěpánková</u> , Katarína Vorčáková	122
1Po26 LASER DESORPTION IONISATION TIME-OF-FLIGHT MASS SPECTROMETRY (LDI TOFMS) OF CHALCOGENIDE GLASSES FROM PSEUDO-BINARY (GeSe ₂) _{100-x} (Sb ₂ Se ₃) _x SYSTEM <u>Katarína Šútorová</u> , Lubomír Prokeš, Virginie Nazabal, Marek Bouška, Petr Němec, and Josef Havel	122
1Po27 PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE NANOČÁSTICOVÝCH LÉKOVÝCH FOREM PŘÍRODNÍCH IMUNOSTIMULANS <u>Jiří Trousil*</u> , Lech Szczepaniak, Peter Černocho, Martin Hrubý, Petr Stěpánek	123
1Po28 CRYSTAL, ELECTRONIC STRUCTURE AND O—H---O AND C—H---O INTERACTIONS IN TWO 6-OXOPIPERIDINE-2-CARBOXYLIC ACID DERIVATIVES <u>Viktor Vrábek</u> , Július Sivý, Peter Šafař, Štefan Marchalín	123

Postery - sekcia 2 Anorganická a materiálová chémia..... 125

2Po01 DYNAMIKA KOMPLEXŮ EU(III) S MAKROCYKlickými LIGANDY POHLEDEM NMR <u>Jan Blahut</u> , Jan Kotek, Petr Hermann, Zdeněk Tošner	125
2Po02 PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE NANOČÁSTIC CdS; INKORPORACE DO TENKÝCH VRSTEV As ₃₀ S ₇₀ <u>Vladimíra Gutwirthová</u> , Karel Pálka, Miroslav Vlček	125
2Po03 MOLYBDENANY A VODIVÉ POLYMERY V OCHRANNÝCH ORGANICKÝCH POVLACÍCH <u>Tereza Hájková</u> , Andrea Kalendová	126
2Po04 CHALCOGENIDOVÁ SKLA SYSTÉMU GE-SE-AS <u>Martina Hejdová</u> , Eva Černošková, Zdeněk Černošek, Jana Holubová, Rosen Todorov, Milan Vlček, Kateřina Nechvílová	126
2Po05 MODIFIKACE ZVYŠUJÍCÍ ANTIBAKTERIÁLNÍ ÚČINEK FOTOAKTIVNÍCH NANOVLÁKENNÝCH VRSTEV <u>Petr Henke</u> , Pavel Kubát, Jiří Mosinger	127
2Po06 MERANIE ZMIEN ROZMEROV UHLÍKATÝCH MATERIÁLOV VPLYVOM INTERKALÁCIE SODÍKA DEPONOVANÉHO Z ROZTAVENÝCH SOLÍ <u>Jana Jurišová</u> , Vladimír Danielik, Pavel Fellner	127
2Po07 STUDIUM VLASTNOSTÍ A STRUKTURY BOROFOSFÁTOVÝCH SKEL BARNATÝCH <u>Petr Kalenda</u> , Ladislav Koudelka, Petr Mošner, Zdeněk Černošek	128

2Po08 DUSIČNAN 3-AMINO-5-METHOXY-4,5-DIHYDRO-1,2,4-TRIAZINIA – NOVÝ SLIBNÝ MATERIÁL PRO GENEROVÁNÍ DRUHÉ HARMONICKÉ FREKVENCE <u>Matouš Kloda</u> , Ivana Císařová, Tomáš Janda, Petr Němec, Ivan Němec	128
2Po09 EFFECT OF CALCINATION TEMPERATURE OF Ni-Ce/Al ₂ O ₃ CATALYSTS ON THE STRUCTURE OF Ni-SPECIES AND CATALYTIC ACTIVITY IN DRY REFORMING OF CH ₄ <u>Martin Kout</u> , Lucie Smoláková, Victor Manuel Gonzalez-Delacruz, Alfonso Caballero, Libor Čapek	129
2Po10 LANTHANIDE(III)-DOTA-LIKE COMPLEXES WITH PENDANT AMINOPHOSPHONATE AS NEW PARACEST CONTRAST AGENTS FOR MRI <u>Tereza Krchová</u> , Jan Blahut, Ivana Císařová, Jan Kotek	129
2Po11 KRYŠTÁLOVÁ ŠTRUKTÚRA (2,1,3-BENZOSELENADIAZOL-4-YL)AMINOMETYLÉNMALÓNANU ETYLOVÉHO <u>Ján Lokaj</u> , Ján Moncol, Maroš Bella, Viktor Milata	130
2Po12 LIKVIDACE ODPADNÍCH VOD Z VÝROBY TŘASKAVIN Libor Mastný	130
2Po13 FOTOKATALYTICKÁ AKTIVITA SONOCHEMICKY RIPRAVENÉHO TiO ₂ DOPOVANÉHO NANOČASTICAMI UŠLACHTILÝCH KOVŮ <u>Robert Michal</u> , Mária Čaplovičová, Gustav Plesch	131
2Po14 FOTOKATALYTICKÉ VLASTNOSTI V-DOPOVANÝCH NANORÚROK TiO ₂ ŽÍHANÝCH V OXIDAČNEJ A REDUKČNEJ ATMOSFÉRE <u>Martin Motola</u> , Gustav Plesch, Leonid Satrapinsky, Marián Mikula, Tomáš Roch, Maroš Gregor	131
2Po15 VYUŽITÍ POVRCHOVÉ ÚPRAVY PIGMENTŮ NA BÁZI SiO ₂ VRSTVOU VODIVÉHO POLYMERU <u>Kateřina Nechvílová</u> , Kateřina Matoušová, Andréa Kalendová	132
2Po16 VPLYV ULTRAZVUKOVEJ KAVITÁCIE NA TVORBU A-AL ₂ O ₃ <u>Daniela Nýblová</u> , Peter Billik, Roman Bystrický, Juraj Filo	132
2Po17 OPTIMIZATION OF SELECTIVITY AND RATE OF COMPLEXATION OF COPPER RADIOISOTOPES <u>Monika Paúrová</u> , Jan Kotek, Petr Hermann	133
2Po18 ANTIBAKTERIÁLNÍ ÚČINKY PALLADIOVÝCH NANOSTRUKTUR DEPONOVANÝCH NA POLYETHYLENNAFTALÁT <u>Markéta Polívková</u> , Zdeňka Novotná, Jakub Siegel, Václav Švorčík	133
2Po19 LASER ABLATION GENERATION OF SB _M AS _N CLUSTERS FROM MIXTURES OF ELEMENTS AND SB-AS NANO-LAYERS. LASER DESORPTION IONIZATION QUADRUPOLE ION TRAP TIME-OF-FLIGHT MASS SPECTROMETRY <u>Lubomír Prokeš</u> , Vlasta Štěpánová, Kristína Hajtmanová, Milan Alberti, Eladia María Peña-Méndez, and Josef Havel	134
2Po20 STUDY OF THE INORGANIC MATERIALS INFLUENCE IN TREAD COMPOUNDS Zuzana Mičicová, Mariana Pajtašová, <u>Lukáš Raník</u> , Darina Ondrušová	135

2Po21 TAYLORING OF PEEK BIOACTIVITY: IMPACT OF PLASMA AND GOLD SPUTTERED INTERFACE <u>Alena Řezníčková</u> , Jakub Siegel, Václav Švorčík	135
2Po22 METAL NANOPARTICLES FOR BIOLOGICAL APPLICATIONS <u>Jakub Siegel</u> , Marek Staszek, Markéta Polívková, Alena Řezníčková, Václav Švorčík	136
2Po23 PERIODICKÁ STRUKTURA NA POVRCHU PEN INDUKOVANÁ EXCIMEROVÝM LASEREM PŘI ÚHLU DOPADU 0 AŽ 45° P. Slepíčka*, O. Neděla, N. Slepíčková Kasálková, Z. Kolská, V. Švorčík	137
2Po24 VLIV ZLATÝCH NANOČÁSTIC A ZPŮSOBU JEJICH PŘÍPRAVY NA VLASTNOSTI PHB <u>Nikola Slepíčková Kasálková</u> , Petr Slepíčka, Petr Sajdl, Silvie Rimpelová, Václav Švorčík	137
2Po25 STUDIUM TVORBY POLYMORFŮ CaCO_3 BĚHEM KARBONATACE SUSPENZE NANOVÁPNA V ETHANOLU <u>Radek Ševčík</u> , Marta Pérez-Estébanez, Petra Mácová	138
2Po26 STUDIUM TUHÉ FRAKCE ATMOSFÉRICKÉHO AEROSOLU Z PLZNĚ POMOCÍ RENTGENOVÉ PRÁŠKOVÉ DIFRAKCE - ANEB VÍTE CO DÝCHÁTE? <u>Ondřej Vík</u> , David Havlíček	138
2Po27 VLIV TROJMOCNÝCH OXIDŮ NA STRUKTURU A VLASTNOSTI OLOVNATÝCH FOSFOREČNANOVÝCH SKEL <u>Maryna Vorokhta</u> , Jan Chmelík, Petr Mošner, Ladislav Koudelka	139
2Po28 SYNTÉZA NANOČÁSTIC NA BÁZI KVANTOVÝCH TEČEK <u>Marek Weinštuk</u> , Stanislava Rybáková, Přemysl Lubal	139
Postery - sekcia 3 Organická chémia a polyméry 140	
3Po01 POLYPYRROLE NANOTUBES PREPARED AT VARIOUS CONCENTRATIONS OF METHYL ORANGE <u>Elizaveta Alekseeva</u> , Jan Prokeš, Patrycja Bober, Miroslava Trchová, Jaroslav Stejskal	140
3Po02 RECYKLOVATELNÉ ENANTIOSELEKTIVNÍ ORGANOKATALYZÁTORY PRO MICHAELOVY REAKCE ZALOŽENÉ NA IMOBILIZOVANÝCH ACYLTHIOMOČOVINÁCH <u>Ladislav Androvič</u> , Pavel Drabina, Miloš Sedlák	140
3Po03 STUDIUM CHEMISORPCE BUTYLAMINŮ NA POVRCH Ni-, Co- A Cu-KATALYZÁTORŮ <u>Dana Bílková</u> , Jiří Krupka, Jakub Havlík	141
3Po04 SPECTRAL STUDY OF INTERACTIONS OF PYRENE BASED PROBES IN POLYMER MATRICES <u>Martin Danko</u> , Peter Kasák, Pavol Hrdlovič	141
3Po05 PŘÍPRAVA A OPTIMALIZÁCIA VLASTNOSTÍ POLYMÉRNÝCH GÉLOV, URČOVANIE ŠTRUKTÚRY LÁTKO PROSTREDNÍCTVOM REZIDUÁLNÝCH DIPÓLOVO-DIPÓLOVÝCH INTERAKCIÍ <u>Jana Doháňošová</u> , Michal Šoral, Tibor Liptaj	142

3Po06 PŘÍPRAVA NOVÝCH GLAKOKLASTRŮ ZA VYUŽITÍ Pd-KATALYZOVANÉ REAKCE <u>Lenka Erhartová</u> , Kamil Parkan	143
3Po07 STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA POLÁRNYCH ČASTÍ RHIZOCHALÍNU C <u>Milica Fabišíková</u> , Miroslava Martinková, Jozef Gonda.....	143
3Po08 UNUSUAL BEHAVIOR OF THE 4-BROMISOXAZOLIDIN-5-OLS IN REACTIONS WITH ALKOXIDES <u>Róbert Fischer</u> , Viera Rolincová, Livia Dikošová, Zuzana Vývleková, Radka Štadániová, Ondrej Záborský	144
3Po09 SYNTÉZA SUBSTITUOVANÝCH 1-(FENYLKARBAMOYL)NAFTALEN-2-YL ALKYLKARBAMÁTŮ S POTENCIÁLNÍ ANTIMYKOBAKTERIÁLNÍ AKTIVITOU <u>Tomáš Goněc</u> , Josef Stráník, Jiří Kos, Michal Oravec, Josef Jampilek.....	144
3Po10 BIOPOLYMERS PRODUCED BY FRESHWATER MICROALGAE <u>Michal Halaj</u> , Peter Capek, Vladimír Cepák, Jaroslav Lukávsky, Pavel Přibyl	145
3Po11 ORGANIC GEOCHEMISTRY OF CZECH AMBER <u>Martina Havelcová</u> , Ivana Sýkorová, Vladimír Machovič, Karel Mach, Zdeněk Dvořák.....	146
3Po12 DESIGN SYNTÉZY s-TRIAZINŮ S NOVÝMI PIPERAZINOVÝMI STRUKTURNÍMI MOTIVY A JEHO REALIZACE S VYUŽITÍM METOD „ZELENÉ CHEMIE“ <u>Eva Havránková</u> , Jozef Csöllei, Pavel Pazdera	146
3Po13 BIODECORATED QUANTUM DOTS AND THEIR CONJUGATES. Ignác Capek, Peter Capek, Zuzana Hloušková.....	147
3Po14 VÝVOJ NOVÝCH FOTOREDOX KATALYZÁTORŮ Zuzana Hloušková, Filip Bureš	147
3Po15 SYNTÉZA MAKROINICIÁTOROV A PŘÍPRAVA DIBLOKOVÝCH KOPOLYMÉROV Ludmila Hřčková, Jozef Kollár, Štefan Chmela, Eva Macová, Alena Šišková, Dušan Berek	148
3Po16 EXPANDING THE SCOPE OF MO(VI)-CATALYZED TRANSFORMATIONS OF CARBOHYDRATES Zuzana Hricoviniová	148
3Po17 SYNTÉZA CYKlickÝCH SLOUČENIN ZA VYUŽITÍ ORGANOKATALÝZY A KATALÝZY KOMPLEXY PŘECHODNÝCH KOVŮ <u>David Hurný</u> , Marek Remeš, Jan Veselý	149
3Po18 DEGRADÁCIA CELULÓZY A JEJ DERIVÁTOV <u>Ivica Janigová</u> , Jozef Rychlý, Katarína Csomorová, Lyda Rychlá.....	149
3Po19 SESKVITERPENOVÉ LAKTONY Z LASERPITIUM ARCHANGELICA <u>Michal Jurášek</u> , Miloš Majdl, Pavla Tomanová, Silvie Rimpelová, Vladimíra Pavlíčková, Eva Kmoníčková, Tomáš Ruml, Juraj Harmatha, Pavel B. Drašar.....	150
3Po20 KARBONYLÁCIA S [Fe(CO) ₅] V SYNTÉZE INHIBÍTOROV TOPOIZOMERÁZY <u>Matej Babjak</u> , Tibor Gracza, <u>Beáta Kandriková</u> , Jakub Ondriaš, Diana Pogányová, Patrik Šurab, Lucia Veselovská.....	150

3Po21 PUSH-PULL CHROMOPORY S LINEÁRNÍM, KVADRUPOLOÁRNÍM A TRIPODÁLNÍM STRUKTURNÍM USPOŘÁDÁNÍM <u>Milan Klikar</u> , Filip Bureš.....	151
3Po22 RING-SUBSTITUTED 8-HYDROXYQUINOLINE-2-CARBOXANILIDES AS POTENTIAL ANTICUBERCULAR AGENTS <u>Jiří Kos</u> , Tomáš Goněc, Eoghan Nevin, Aidan Coffey, Josef Jampílek	152
3Po23 SYNTÉZA A BIOLOGICKÁ AKTIVITA PEPTIDOVÝCH KONJUGÁTŮ ANTIMYKOBAKTERIÁLNÍCH SALICYLANILIDŮ <u>Martin Krátký</u> , Szilvia Bösze, Zsuzsa Baranyai, Jarmila Vinšová	152
3Po24 CONJUGATED KINASE INHIBITORS FOR TARGETED TRANSPORT INTO CANCER CELLS Tomáš Gucký, <u>Vladimír Kryštof</u>	153
3Po25 POLYMERNÍ KONJUGÁT ZÁŘIČE AUGEROVÝCH ELEKTRONŮ PRO VÍCESTUPŇOVOU CÍLENOU TERAPII NÁDORŮ <u>J. Kučka</u> , J. Mattová, O. Sedláček, M. Zadinová, P. Poučková, M. Hrubý	153
3Po26 OXALYL CHLORIDE AS EX-SITU DONOR OF CARBON MONOXIDE IN CARBONYLATION REACTIONS Martin Markovič, <u>Pavol Lopatka</u> , Peter Kooš, Tibor Gracza	154
3Po27 SYNTHESIS AND UTILIZATION OF NOVEL NITRONE AND BICYCLIC ISOXAZOLIDINES AS PRECURSORS OF PYRROLIZIDINES <u>Tomáš Malatinský</u> , Mária Spišáková, Róbert Fischer	154
3Po28 FRUSTRATED LEWIS PAIRS-ASSISTED REDUCTION OF CARBONYL COMPOUNDS <u>Aleš Marek</u> , Martin H. F. Pedersen	155
3Po29 VLASTNOSTI NANOKOMPOZITOV NA BÁZE TERMOPLASTICKEJ MATRICE <u>Zuzana Nógellová</u> , Daniela Jochec Mošková, Michaela Sedničková, Ivan Chodák	156
3Po30 ACTUATORS ON THE BASE OF ETHYLENE VINYL ACETATE/CARBON NANOTUBES/DYES NANOCOMPOSITES Klaudia Czaniková, Asma Ben Sghaier, Mohamed M. Chehimi, <u>Mária Omastová</u>	156
3Po31 SYNTÉZA SÉRIE 1-[4-ALKYLSULFANYL)FENYL]-3,3-DIMETHYLGUANIDINŮ S ANTIFUNGÁLNÍ AKTIVITOU <u>Palát Karel</u> , Emelin Evghenia, Dominika Jarešová, Buchta Vladimír, Petr Jílek, Marcela Vejsová	157
3Po32 NEW COMPOSITE ELECTRODE MATERIALS FOR LITHIUM BATTERIES Anna Pidluzhna, <u>Silvia Podhradská</u> , Daria Matulka, Mária Omastová	157
3Po33 ŠTÚDIUM VPLYVU CHRÁNIACICH FUNKČNÝCH SKUPÍN NA OXIDATÍVNE ŠTIEPENIE C=C DVOJITEJ VÁZBY SUBSTRÁTOV VYCHÁDZAJÚCICH Z KYSELINY ŠIKIMOVEJ <u>Miroslav Psotka</u> , Jozef Gonda, Miroslava Martinková.....	158
3Po34 APLIKACE BOR-WITTIGOVY REAKCE V CHEMII SACHARIDŮ <u>Kristýna Řepková</u> , Kamil Parkan	158

3Po35 Vliv IONIZUJÍCÍHO ZÁŘENÍ NA BIOKOMPATIBILNÍ POLYMERY <u>Ondřej Sedláček</u> , Jan Kučka, Martin Hrubý	158
3Po36 INFLUENCE OF SURFACE MODIFICATION OF MONTMORILLONITE ON RUBBER COMPOSITES <u>Michaela Sedničková</u> , Daniela Joheć Mošková, Ivica Janigová, Ľuboš Jankovič, Ivan Chodák	159
3Po37 STEREOSELECTIVE CU-CATALYZED DOUBLE 1,4-ADDITION IN THE PRESENCE OF PHOSPHANE-CARBENE LIGANDS <u>Zuzana Sorádová</u> , Jana Máziková, Mária Mečiarová, Radovan Šebesta	159
3Po38 SYNTÉZA CYKlickÝCH VINYLKETONŮ A JEJICH HYDROKYANACE <u>Jan Šimbera</u> , Karel Zelinka, Kateřina Hlaváčková, Dana Herová a Pavel Pazdera.....	160
3Po39 STUDIUM GEOMETRIE A KINETIKY DEGRADACE INJIKOVATELNÝCH DEP NA BÁZI POLY(N-ISOPROPYLAKRYLAMIDU) <u>Pavel Švec</u> , Ondřej Sedláček, Andrea Gálisová, Markéta Jirátová, Daniel Jiráć, Martin Hrubý	160
3Po40 SYNTÉZA A VYUŽITÍ THIAZOL-4,5-DIKARBONITRILU V PUSH-PULL SLOUČENINÁCH <u>Šárka Švecová</u> , Filip Bureš.....	161
3Po41 STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA METYL-(5R)-5-C-[2'-(BENZYLOXY)ETYL]-3,5-DIDEOXY-1,2-O-IZOPROPYLIDÉN-3-(2',2',2'-TRICHLÓRACETAMIDO)-3-C-VINYL-β-L-ARABINO-HEXOFURÁNURONÁTU AKO PREKURZORA SALINOSPORAMIDU A <u>Margaréta Takáčsová</u> , Miroslava Čonková, Miroslava Martinková, Jozef Gonda.....	161
3Po42 PHARMACOLOGICAL EFFECT OF BEECH GLUCURONOXylan SULFATES Veronika Sivová, Gabriela Nosáľová, Ľudovít Jureček, <u>Jozef Turjan</u> , Ján Kozák, Peter Capek.....	162
3Po43 STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA NOVÝCH B-AMINOKYSELÍN A ŠTÚDIUM ICH ORGANOKATALYTICKEJ AKTIVITY V INTRAMOLEKULOVÝCH ALDOLOVÝCH CYKLIZÁCIÁCH <u>Monika Tvrdóňová</u> , Miroslava Martinková a Jozef Gonda	162
3Po44 67. ZJAZD CHEMIKOV, 7. – 11. SEPTEMBER 2015, VYSOKÉ TATRY <u>Jiří Veselý</u> , Ivan Veselý, Jan Pavlík	163
3Po45 MAKROPORÉZNY UHLÍKOVÝ SCAFFOLD PRE TKANIVOVÉ INŽINIERSTVO <u>Miroslav Vetrík</u> , Martin Pařízek, Olívia Policianová, Helena Hlídková ,Miroslav Šlouf , Martin Přádný,Martin Hrubý	163
3Po46 SYNTHESIS AND ANTIMICROBIAL ACTIVITY OF NOVEL SULFONAMIDE DERIVATIVES <u>Jarmila Vinšová</u> , Martin Krátký, Martin Kufa, Jiřina Stolaříková	163
3Po47 SYNTÉZA FORCYKLAMENALDEHYDU A JEHO HYDROGENACE S VYUŽITÍM Pd KATALYZÁTORŮ <u>Eva Vrbková</u> , Eliška Vyskočilová, Martina Votroubková, Martin Zapletal, Libor Červený	164
3Po48 SYNTHESIS OF 5-SUBSTITUTED 4-HYDROXYISOXAZOLIDINES VIA „ISOXAZOLIDINYL EPOXIDES“ <u>Ondřej Záborský</u> , Róbert Fischer.....	164

3Po49 SYNTÉZA NOVÝCH DERIVÁTŮ TRILOBOLIDU Tomáš Zimmermann, Pavel Drašar	165
---	-----

3Po50 FUNKCIONALIZOVANÉ UHLÍKOVÉ NANOČÁSTICE PRO MEDICÍNSKÉ APLIKACE Pavlna Žáková, Zdeňka Kolská, Jindřich Leitner, Václav Švorčík	165
---	-----

Postery - sekcia 4 Vyučovanie a história chémie 166

4Po01 INOVACE STUDIJNÍCH PŘEDMĚTŮ INTERMEDIÁTY CHEMICKÝCH VÝROB A VÝROBA LÉČIV V MAGISTERSKÉM STUPNI STUDIA SPECIALIZACE TECHNOLOGIE ORGANICKÝCH SPECIALIT V RÁMCI PROJEKTU IRS2015/034. Jan Dušek, Aleš Imramovský, Karel Pauk	166
--	-----

Postery - sekcia 5 Potravinárstvo, životné prostredie a biotechnológia..... 167

5Po01 CÍLENÝ TRANSPORT LÉČIV POMOCÍ POKROČILÝCH NANOTECHNOLOGIÍ Ingrid Brezániová, Vladimír Král, Zulfiya Černochová, Martin Hrubý,	167
--	-----

5Po02 HODNOCENÍ JADER PRO VÝVOJ PELET S ŘÍZENÝM UVOLŇOVÁNÍM GLUKÓZY K PREVENCI HYPOGLYKÉMIE Sylvie Pavloková, <u>Aleš Franc</u> , Jan Muselík, Dana Sabadková, Pavlna Kopecká, David Neumann.....	167
---	-----

5Po03 VÝVOJ PELIET S ONESKORENÝM UVOLŇOVÁNÍM SACHARIDU K PREVENCI HYPOGLYKÉMIE Dana Sabadková, <u>Aleš Franc</u> , Jan Muselík, Pavlna Kopecká, Sylvie Pavloková, David Neumann.....	168
--	-----

5Po04 VYUŽITIE MODIFIKOVANÝCH ZEOLITOV NA FOTOKATALYTICKÚ REDUKCIU CO ₂ <u>Jana Jokrllová</u> , Gabriel Čík, František Šeršeň, Helena Švajdlenková, Miroslava Lukešová	168
---	-----

5Po05 SELECTED SPECIAL APPLICATIONS OF POTENTIOMETRY OF METALS DETERMINATION IN AQUEOUS SOLUTIONS Abraham Kabutey, Ladislav Novotný, <u>Veronika Kočanová</u> , Renáta Petráňková, Petr Langášek, Edwin Wallace, Libor Dušek.....	169
--	-----

5Po06 VYUŽITÍ REHYDRATOVANÝCH KAOLÍNŮ PRO DEKONTAMINACI ARSENU, ANTIMONU A SELENU <u>Miloslav Lhotka</u> , Barbora Doušová, Vladimír Machovič.....	169
--	-----

5Po07 ALTERNATIVNÍ PODMÍNKY POTENCIOMETRICKÉHO SLEDOVÁNÍ VÝROBY ČISTÝCH VOD ZEJM. PRO ENERGETIKU POMOCÍ AMALGAMOVÉ ELEKTRODY <u>Ladislav Novotný</u> , Petr Langášek, Renáta Petráňková, Veronika Kočanová, Abraham Kabutey, Libor Dušek	170
---	-----

5Po08 BIOLOGICKÉ ODBOURÁVÁNÍ KYANIDŮ Z MODELOVÝCH ODPADNÍCH VOD <u>Jiří Palarčík</u> , Lucie Pešková, Jana Muselíková, Radek Sleha	170
---	-----

5Po09 ANALÝZA ALLOXANU KAPILÁRNÍ ZÓNOVOU ELEKTROFORÉZOU Jana Horská, <u>Kateřina Vítková</u> , Jana Jurčíková, Václav Procházka, Andrea Šebestová, Jan Petr	171
--	-----

Postery - sekcia 6 CHEMPROGRESS.....	172
---	------------

6Po01 VODIVÉ NANOVLÁKENNÉ KOMPOZITY PRIPRAVENÉ ELEKTROSTATICKÝM ZVLÁKŇOVANÍM <u>Eliška Číková</u> , Matej Mičušík, Alena Šišková, Pavol Fedorko, Mária Omastová.....	172
6Po02 67. ZJAZD CHEMIKOV, 7. – 11. SEPTEMBER 2015, VYSOKÉ TATRY <u>Jozef Dámer</u> , Berka Jan, Vít Jan.....	172
6Po03 BIOGLYCEROL PLATFORM <u>Alexander Kaszonyi</u> , Magdaléna Štolcová.....	173
6Po04 ELEKTROCHEMICKÁ ALKALIZACE NEUTRÁLNÍCH ROZTOKŮ <u>Martin Paidar</u> , Martin Roubalík.....	173
6Po05 POROVNÁNÍ PRŮBĚHŮ REAKCE VYBRANÝCH UHLIČITANOVÝCH SUROVIN VE ZŘEDĚNÝCH ROZTOCÍCH KYSELINY SÍROVÉ <u>Martin Pultar</u> , Ivona Sedlářová, Jan Videnský	173
6Po06 EFFECT OF PREPARATION METHOD ON THE PROPERTIES OF PALLADIUM BISMUTH NANOPARTICLES STABILISED WITHIN POLYMERIC RESIN AS CATALYSTS FOR BIOGLYCEROL OXIDATION WITH MOLECULAR OXYGEN <u>Magdaléna Štolcová</u> , Stanislav Vajíček, Alexander Kaszonyi	174
6Po07 VYUŽITÍ MEMBRÁNOVÉ SEPARACE PRO REGENERACI HÉLIA Z OCHRANNÉ OBÁLKY PLYNEM CHLAZENÉHO REAKTORU. <u>Jan Vít</u> , Jan Berka.....	174

Autorský index	176
-----------------------------	------------

Program prednášok	183
--------------------------------	------------

PLENÁRNA PREDNÁŠKA

PERSPECTIVES IN CHEMISTRY: FROM SUPRAMOLECULAR CHEMISTRY TOWARDS ADAPTIVE CHEMISTRY

Jean-Marie LEHN

ISIS, Université de Strasbourg, France

Supramolecular chemistry is actively exploring systems undergoing self-organization, i.e. systems capable of spontaneously generating well-defined functional supramolecular architectures by self-assembly from their components, on the basis of the molecular information stored in the covalent framework of the components and read out at the supramolecular level through specific non-covalent interactional algorithms, thus behaving as programmed chemical systems.

Supramolecular chemistry is intrinsically a dynamic chemistry in view of the lability of the interactions connecting the molecular components of a supramolecular entity and the resulting ability of supramolecular species to exchange their components. The same holds for molecular chemistry when the molecular entity contains covalent bonds that may form and break reversibly, so as to allow a continuous change in constitution by reorganization and exchange of building blocks. These features define a Constitutional Dynamic Chemistry (CDC) covering both the molecular and supramolecular levels.

CDC introduces a paradigm shift with respect to constitutionally static chemistry. It takes advantage of dynamic diversity to allow variation and selection and operates on dynamic constitutional diversity in response to either internal or external factors to achieve adaptation.

CDC generates networks of dynamically interconverting constituents, constitutional dynamic networks, presenting agonistic and antagonistic relationships between their constituents, that may respond to perturbations by physical stimuli or to chemical effectors.

The implementation of these concepts points to the emergence of adaptive and evolutive chemistry, towards systems of increasing complexity.

- [1] Lehn, J.-M., *Supramolecular Chemistry: Concepts and Perspectives*, VCH Weinheim, 1995.
- [2] Lehn, J.-M., Dynamic combinatorial chemistry and virtual combinatorial libraries, *Chem. Eur. J.*, 1999, 5, 2455.
- [3] Lehn, J.-M., Programmed chemical systems : Multiple subprograms and multiple processing/expression of molecular information, *Chem. Eur. J.*, 2000, 6, 2097.
- [4] Lehn, J.-M., Toward complex matter: Supramolecular chemistry and self-organization, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 2002, 99, 4763.
- [5] Lehn, J.-M., From supramolecular chemistry towards constitutional dynamic chemistry and adaptive chemistry, *Chem. Soc. Rev.*, 2007, 36, 151.
- [6] Lehn, J.-M., Chapter 1, in *Constitutional Dynamic Chemistry*, ed. M. Barboiu, *Topics Curr. Chem*, 2012, 322, 1-32.
- [7] Lehn, J.-M., Perspectives in Chemistry – Steps towards Complex Matter, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2013, 52, 2836-2850.

POZVANÉ PREDNÁŠKY

PP1

APPLICATION OF NANOMATERIALS AND NANOSCALE-CONTROLLED IMMOBILIZATION FOR PREPARATION OF ULTRASENSITIVE BIOSENSORS AND BIOFUEL CELLS

Jan Tkáč¹, Tomáš Bertók¹, J. Filip¹, Ľudmila Kluková¹, András Hushegyi¹, Dominika Pihíková¹, Štefan Belický¹

¹ *Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovakia, Jan.Tkac@savba.sk*

Application of nanotechnology revolutionises many scientific discipline either by using a diverse range of nanomaterials or applying tools, which are able to control interfacial properties at nanoscale. Construction of functional biodevices such as biosensors and biofuel cells [BFCs] is no exception and such devices are prepared with tailored interfacial properties for effective coupling of biorecognition/biocatalyst elements.

There are several patterning protocols applicable to increase biocatalyst's loading and an accessibility of the biofuel to the biocatalysts within a 3-D structure [1]. The main objective of our previous work was to prepare BFCs in a cost-effective way using abundant sources of carbon

nanostructured material, but also carbon nanotubes and graphene, integrated with enzymes and bacterial cells.

Lectin and glycan biosensors based on electrochemistry working in an ultrasensitive way with a label-free mode of detection were described [2]. Such devices were constructed with a precisely tuned density of ligands (lectin and glycans) on gold modified surfaces. An increase of the biodevice sensitivity using gold nanoparticles with a 3-D architecture is provided. Such devices were successfully applied in analysis of serum samples from patients with some diseases [3], in assays of various cancer cell lines and in cancer diagnostics.

The financial support from the Slovak research and development agency APVV 0282-11 is acknowledged. The research leading to these results has received funding from the European Research Council under the European Union's Seventh Framework Programme (FP/2007-2013)/ERC Grant Agreement No. 311532 and from the European Union's Seventh Framework Programme for research, technological development and demonstration under grant agreement No. 317420.

- [1] J Filip, J Šefčovičová, P Gemeiner, J Tkac, *Electrochim. Acta* (2013) 87, 366.
- [2] E Paleček, J Tkac, M Bartošík, T Bertok, V Ostatná, J Paleček, *Chem. Rev.* (2015) 105, 2045.
- [3] Bertok T, Klukova L, Sediva A, Kasák P, Semak V, Micusik M, Omastova M, Chovanová L, Vlček M, Imrich R, Vikartovska A, Tkac J, *Anal. Chem.* (2013) 85, 7324.

PP2 VÝVOJ NOVÝCH SYNTETICKÝCH POSTUPU A JEJICH APLIKACE PRI SYNTÉZE PŘÍRODNÍCH LÁTEK

Jiří Pospíšil¹

¹ *Laboratoř růstových regulátorů, Centrum regionu Haná pro zemědělský a biotechnologický výzkum, Univerzita Palackého v Olomouci & Ústav experimentální botaniky AV ČR, Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc, j.pospisil@upol.cz*

Přírodní látky jsou i v dnešní době nevysychající studnicí nových a někdy i obtížně představitelných strukturních motivů. Z pohledu naší skupiny je tato „nevýčerpatelná“ zásobárna nových strukturních motivů a možností opravdovým zlatým dolem pro který se snažíme navrhnout nové syntetické postupy a metody. Naš zájem se minulosti zaměřil zejména na dvě oblasti organické syntézy: (1) tvorba násobných

vazeb C-C [1, 2], a (2) divergentní syntéza začínající z jednoho společného intermediátu nebo reagentu [2].

V prvním případě jsme se zaměřili zejména na olefinační reakce založené na využití (hetero)aryl-alkyl sulfonů (Julia-Lythgoe olefinační reakce a její 2. generace) s cílem zlepšit jejich selektivitu a aplikovat naše nové poznatky v kontextu cílené syntézy vybraných přírodních látek [1].

V rámci divergentní syntézy jsme se zaměřili na přípravu jednoho typu strukturního motivu, který by sloužil jako základní intermediát při syntéze přírodních látek (např. lignanů). Hlavním kritériem při výběru tohoto typu intermediátu byla jeho schopnost reagovat chemoselektivně s různými reagenty a činidly bez nutnosti zavést dočasné chránící a pomocné skupiny.

V rámci přednášky budou prezentovány poslední výsledky získané v rámci těchto projektů.

Tato práce vznikla za podpory Univerzity Palackého (interní granty IGA: PŘF_2014_006 a IGA: PŘF_2015_021). Autor by dále chtěl poděkovat za podporu, kterou Dr. Alfred Bader poskytuje českým chemikům.

- [1] Jiří Pospíšil: *Tetrahedron Lett.* 52, 2348 (2011).
- [2] Jiří Pospíšil, Raphaël Robiette, Hitoshi Sato, Kevin Debrus: *Org. Biomol. Chem.* 10, 1225 (2012).

PP3 VYUŽITIE NETRADIČNÝCH ELEKTRODOVÝCH MATERIÁLOV VO FARMACEUTICKEJ A KLINICKEJ ANALÝZE

Lubomír Švorc

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

Jedným z hlavných smerov súčasného rozvoja moderných elektroanalytických metód je vývoj nových a perspektívnych (netradičných) elektródových materiálov, ktoré budú odolnejšie voči pasivácii povrchu pracovnej elektródy, so širokým využiteľným potenciálovým rozsahom v katodickej aj anodickej oblasti a použiteľné aj ako elektrochemické senzory (detektory) v prietokových systémoch [1]. Práca sa zaoberá vývojom nových postupov a metód založených na použití bórom dopovanej diamantovej elektródy ako citlivého a environmentálne akceptovateľného elektrochemického senzora

schopného v niektorých aplikáciách nahradiť tradičné uhlíkové elektródové materiály (grafit, sklovitý uhlík, uhlíková pasta). Tento perspektívny materiál významným spôsobom rozširuje možnosti stanovenia submikromolárnych až nanomolárnych koncentrácií u liečiv a ich metabolitov, ktoré sa elektrochemicky oxidujú alebo redukovujú pri vysokých potenciáloch [2]. Medzi takéto analyty patria niektoré antibiotiká (penicilín V), opiáty (morfin, kodeín), amfetamíny (metamfetamín) a DNA bázy (guanín, adenín).

V príspevku budú zhrnuté výhody a nevýhody nových elektroanalytických metód a postupov, možnosti, obmedzenie a perspektívy ich ďalšieho rozvoja v oblasti farmaceutickej a klinickej analýzy.

Autor ďakuje za podporu Vedeckej grantovej agentúry VEGA MŠ SR a SAV (projekt č. 1/0051/13 a 1/0361/14) a Agentúre na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APVV-0797-11.

- [1] Ľubomír Švorc: Int. J. Electrochem. Sci. 8 (4), 5755-5773 (2013)
- [2] Ľubomír Švorc, Kurt Kalcher: Sens. Actuators, B 205, 215-218 (2014)
- [3] Ľubomír Švorc, Dalibor Stanković, Kurt Kalcher: Diamond Relat. Mater. 42, 1-7 (2014)

PP4

PIVO A ZDRAVIE – OD MÝTOV K VEDE

Daniela Šmogrovičová

*Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
daniela.smogrovicova@stuba.sk*

Prospešný vplyv vína na zdravie sa už traduje, avšak pivo za vínom v tomto smere rozhodne nezaostáva. Mnohé prínosy umierneného pitia piva sú jedinečné iba pre tento druh nápoja vďaka jeho zloženiu, kvôli perfektnej nutričnej vyváženosti a fyziologickým efektom, a okrem toho v porovnaní s ostatnými alkoholickými nápojmi, aj relatívne nízkemu obsahu alkoholu.

Zo zdraviu prospešných zložiek piva majú význam vitamíny skupiny B (pyridoxín, riboflavín, tiamín, biotín, kyseliny patoténová, listová a nikotínová) a minerálne látky (najmä horčík a draslík) i stopové prvky, predovšetkým selén, zinok, meď a chróm.

Dôležitou vlastnosťou piva zo zdravotného hľadiska sú jeho antioxidačné schopnosti. Pivo obsahuje široké spektrum polyfenolov a fenolových kyselín, i flavonoidov. Polyfenolové antioxidanty piva pochádzajú zo sladú aj z chmeľu, flavonoidy z chmeľu. Významným polyfenolovým antioxidantom nachádzajúcim sa

v chmeli je resveratrol (phytoalexin), ktorý pôsobí proti rakovine, kardiovaskulárnym chorobám, a má protizápalové aj antimutagénne účinky. Z flavanoidov v pive dominuje katechín a epikatechín, z chalkonov xantohumul a izoxantohumul, ktoré majú vysoké antikancerogénne účinky. Tieto účinky vykazujú aj α - a β -horké kyseliny piva. Významnou zložkou piva sú aj fytoestrogény.

PP5

NOVÉ PROFLAVÍNY A SPIROCYKLY AKRIDÍNU AKO SĽUBNÉ DNA-INTERKALÁTORY A ANTITUMOROVÉ LÁTKY

Ján Imrich

*Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta
Univerzity P. J. Šafárika, Moyzesova 11,
04001 Košice, jan.imrich@upjs.sk*

Akridíny sa viac ako storočie využívajú ako fluorofóry a antibakteriálne látky. Ich schopnosť interkalovať sa medzi DNA bázoové páry a kvadruplexy im dáva tiež antitumorové vlastnosti. Reaktivita centrálného kruhu akridínu umožňuje spirocyklizácie v polohe 9. Nasýtenie akridínu poskytlo zasa prvé komerčné liečivo Alzheimerovej choroby, takrín (9-amino-1,2,3,4-tetrahydroakridín).

Multiaktivita akridínov podnietila náš záujem o skúmanie reakcií syntónov 9-akridínizotiokyanátu, 9-aminometylakridínu, 9-izotiokyanáto-1,2,3,4-tetrahydroakridínu, proflavínu, 9(4)-akridinylalkénov a akrid-9-ón-4-karbohydrazidov. Preukázali sme výraznú tendenciu akridínového dusíka akceptovať protón a vytvárať 9,10-dihydroakridínové subštruktúry, v rámci ktorých sme pripravili viaceré nové typy spiro(poly)cyklov akridínu ako sú spiro[dihydroakridín-tiazolíny, -tiazolidíny, -triazolidíny, -isoxazolíny a imidazolidin(tí)óny]. Použitie bifunkčných elektrofilných haloesterov a haločyanidov poskytlo nové kombinované 9-substituované heterocykly, ako napr. akridín-tiazolidinóny, -imidazolidinóny, -oxadiazoly a -1,3-tiazíny. NMR parametre akridin-9(4)-ylalkénov umožnili predikovať regioselektivitu ich 1,3-dipolárnych cykloadícií s nitriloxidmi. Nové deriváty proflavínu, 3,6-bis-močoviny, bis-tiomočoviny, bis-guanidíny, bis-tiazolidinóny a bis-imidazolidinóny sa vyznačovali výraznou cytotoxickou korelujúcou s dĺžkou alkylov. Bifunkčné inhibítory z 9-ITK-

1,2,3,4-tetrahydroakridínu a cyklických aminorov mali rádo vyššiu anticholinesterázovú aktivitou oproti mono-analógom. Tiosemikarbazidy akridínu a konjugáty akridínov s izotiokyanátmi sacharidov vykazovali aj významnú antiagregačnú a depolymerizačnú aktivitu voči amyloidným plakom, aktívnym v patogenéze neurodegeneratívnych chorôb. Uvedené výsledky sú sľubné pri hľadaní nových perspektívnych farmakofórov.

PP6

ANTON LEOPOLD RUPRECHT – VÝZNAČNÁ OSOBNOSŤ CHEMICKEJ REVOLÚCIE V 18. STOROČÍ

Jozef Čársky

Ústav lekárskej chémie, biochémie a klinickej biochémie. Lekárska fakulta UK Bratislava

V bohatých dejinách Baníckej akadémie v Banskej Štiavnici už od jej vzniku vedúce postavenie zastávali významné a medzinárodne uznávané osobnosti: M. J. Jacquin, G. A. Scopoli a A. L. Ruprecht.

M. J. Jacquin vybudoval jedno z najlepších chemických laboratórií v Európe, ktoré slúžilo nielen pre praktickú výučbu, ale aj pre výskum. Patril k prvým zástanom Lavoisierovej oxidačnej teórie horenia.

G. A. Scopoli nadviazal na úspešnú činnosť svojho predchodcu s dôrazom na problematiku baníckej a hutníckej mineralógie. Jeho dielo má prioritné postavenie v histórii mineralógie na Slovensku i v Európe. Významné miesto má aj spracovanie opisu rastlín a živočíchov z okolia Banskej Štiavnice podľa Linného systému. Niektoré druhy a poddruhy sú pomenované podľa jeho mena.

A. L. Ruprecht, rodák zo Smolníka (Smolníckej Hutí), absolvent Baníckej akadémie sa preslávil vybudovaním unikátnej mineralogickej zbierky, chemickou analýzou minerálov a zavedením termickej mineralizácie jednoduchých zemín, ktorá znamenala objav nových chemických prvkov. Jeho zásluhou sa Banícka akadémia stala vzorom pre výučbu a centrom chemického výskumu v Európe. Zavádzaním experimentálnych metód založených na meraní a vážení významnou mierou prispel k revolučným zmenám chápania chemických procesov, k podpore Lavoisierovej oxidačnej teórie a porážke flogistonického výkladu horenia a chemického spaľovania. Jeho zásluhou sa

mohla úspešne realizovať v praxi Bornova amalgamačná metóda získavania drahých kovov. Patril k iniciátorom prvého medzinárodného metalurgického kongresu, ktorý sa konal r. 1786 v Sklených Tepliciach za účasti vynikajúcich osobností a odborníkov pre baníctvo, hutníctvo, geológiu, mineralógiu a chémiu z celej Európy. Na tomto kongrese bola založená aj prvá vedecko-technická spoločnosť – Le Societé de l'art de l'exploitation des mines (Societät der Bergbaukunde).

Anton Leopold Ruprecht bol zaradený v *Millenium Project FECS* do zoznamu 100 najvýznamnejších európskych chemikov od chemickej revolúcie do konca 20. storočia.

PP7

RECYKLÁCIA POLYMÉRYCH ODPADOV

Elena Hájeková, Martin Bajus

Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, elena.hajekova@stuba.sk

Pyrolýza odpadných plastov je jednou z perspektívnych metód surovinovej recyklácie. Pri pyrolýze sa využíva termický rozklad dlhých uhlíkových reťazcov polyméru na menšie molekuly – kvapalný depolymerizát, plyny, prípr. tuhý zvyšok, bez prítomnosti kyslíka. Procesy sa uskutočňujú pri teplotách 400 až 700 °C v závislosti od typu plastu a požadovaných produktov. Na recykláciu termickým rozkladom sa používajú viaceré typy polymérov (polyetylén, polypropylén, polystyrén, polyvinylchlorid, polyetyléntereftalát, polyuretány) s rôznou štruktúrou a vlastnosťami.

Na prípravu uhlíkovodíkových frakcií podobných frakciám z ropy sú najvhodnejšie polyalkény [1]. Rôzne petrochemické spoločnosti uvažujú o možnosti recyklovať odpady z polyalkénových plastov v existujúcich rafinérskych zariadeniach, čo by obmedzilo potrebu investícií do výstavby nových spracovateľských kapacít. Existujú dva hlavné prístupy ku koprodukcii plastov v rafinérskych jednotkách: buď sa plasty pridávajú priamo v malých množstvách do ropných frakcií alebo sa odpadné plasty najskôr podrobia pyrolýze a vzniknuté kvapalné produkty sa použijú ako klasická rafinárska surovina. Môžu sa nastreknúť do strednoteplotnej pyrolýzy s cieľom vyrábať znovu použiteľné alkény [2] alebo sa môžu použiť ako surovina pre

katalytické krakovanie alebo hydrokrakovanie a vyrábať tak zložky motorových palív [3]. Výhodou spomenutého prístupu je omnoho väčšia rozpustnosť depolymerizátov v porovnaní s pôvodnými plastami a tiež lepšia manipulácia so zmesou depolymerizátov v kvapalných ropných frakciách.

Prednáška bude venovať pozornosť zaujímavým témam pre chémiu ako sú určovanie absolútnej štruktúry a konfigurácie, štúdium nábojových hustôt z experimentálnych dát, fotokryštalografia a nakoniec aj kryštálovému inžinierstvu, ktoré sa už formuje ako samostatná vedná disciplína na pomedzí chémie a kryštalografie.

- [1] Hájeková E., Mlynková B., Bajus M., Špodová L.: J. Anal. Appl. Pyrolysis, 79, 196-204, 2007.
- [2] Hájeková E., Bajus M.: J. Anal. Appl. Pyrolysis 74, 270-281, 2005.
- [3] Mlynková B., Bajus M., Hájeková E., Kostrab G., Mravec D.: Chem. Pap., 64, 15-24, 2010.

PP8

100 ROKOV CHEMICKEJ KRYŠTALOGRAFIE A PERSPEKTÍVY

Ján Moncol¹

¹Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov,
Fakulta chemickej a potravinárskej technológie,
Slovenská Technická Univerzita, Radlinského 9, 812
35 Bratislava, jan.moncol@stuba.sk

Celý minulý rok (2014) sa niesol v duchu Medzinárodného roku kryštalografie, ktorý bol vyhlásený Organizáciou Spojených národov pre vzdelávanie, vedu a kultúru (UNESCO). Táto udalosť pripomenula významné výročie zásadných experimentov a objavov v oblasti difrakcie röntgenového žiarenia, ktoré pomohli rozvoju viacerých vedných disciplín vrátane chémie. Prednáška má preto za úlohu priblížiť chemickej verejnosti prínosy kryštalografie pre chémiu.

Prednáška je zameraná v prvej časti priblížiť vývoj a rozvoj hlavne chemickej kryštalografie za vyššie 100 rokov od vzniku po súčasnosť. Hlavné medzníky kryštalografie týkajúcej sa najmä chémie. Ďalej sa bude venovať možným poznatkom pre chémiu a chemikov. V poslednej časti budú objasnené nové pohľady a výzvy v chemickej kryštalografii.

PREDNÁŠKY - SEKCIA 1: ANALYTICKÁ A FYZIKÁLNA CHÉMIA

1P01

CHOVÁNÍ DNA OLIGONUKLEOTIDŮ TVOŘÍCÍCH G-KVADRUPEXY NA ELEKTRICKY NABÍTÝCH POVRŠÍCH RTUŤOVÝCH A UHLÍKOVÝCH ELEKTROD

Miroslav Fojta¹, Pavlína Vidláková¹, Hana Pivoňková¹, Iva Kejnovská¹, Libuše Trnková², Michaela Vorlíčková¹, Luděk Havran¹

¹Biofyzikální ústav, Akademie věd ČR, v.v.i.
Královopolská 135, CZ-61265 Brno, Česká republika,
fojta@ibp.cz

²Ustav chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova
univerzita, Kamenice 5, CZ-62500, Brno, Česká
republika

Elektrochemické metody jsou vhodné pro výzkum nukleových kyselin (NK) [1]. Bylo prokázáno, že zejména na rtuťových elektrodách elektrochemické chování NK závislé na jejich struktuře. V této práci jsme sledovali vliv tvorby G-kvadruplexové struktury v centrálním (dG)_n segmentu 15-merních oligonukleotidů na jejich elektrochemické chování na rtuťových (HMDE) a uhlíkových elektrodách. Pozorovali jsme rozdílné efekty v závislosti na počtu guaninů v tomto úseku na výšku píku G^{HMDE} měřeného na HMDE a píku G^{ox} měřeného na elektrodě z pyrolytického grafitu (PGE). Zatímco výška píku G^{ox} rostla kontinuálně s počtem G, výška píku G^{HMDE} rostla do (dG)₅ a výrazně klesala s dalším prodloužováním (dG)_n. CD spektroskopie a gelová elektroforéza prokázaly tvorbu kvadruplexové struktury pro (dG)₅ až (dG)₁₅. Od (dG)₇ byly tyto struktury odolné vůči denaturačním podmínkám. Měření provedená technikami cyklické voltametrie a voltametrie se střídavou složkou proudu ukázala, že kvadruplexová struktura u (dG)₅ je na HMDE narušena, zatímco struktury vytvořené u oligonukleotidů s delším (dG)_n úsekem jsou stabilní v adsorbovaném stavu na negativně nabitým povrchu rtuti. Guaniny spárované Hoogsteenovým párováním vykazují omezenou dostupnost pro redukční procesy na povrchu HMDE, od kterého jsou tyto struktury odpuzovány. Naproti tomu na pozitivně nabitým

povrchu PGE k oxidaci guaninu v kvadruplexové struktuře dochází.

Tato práce byla podpořena Grantovou agenturou České republiky (P206/12/G151) a Akademií věd České Republiky (RVO 68081707).

[1] E. Paleček and M. Bartošík, *Chem Rev* **2012**, 112, 3427-3481

1P02

NEW APPROACHES IN THE DEVELOPMENT OF NOVEL ELECTROCHEMICAL (BIO)SENSORS

Vlastimil Vyskočil

Charles University in Prague, Faculty of Science,
University Research Centre UNCE "Supramolecular
Chemistry", Department of Analytical Chemistry,
UNESCO Laboratory of Environmental
Electrochemistry, Hlavova 2030/8, 128 43 Prague 2,
Czech Republic, vlastimil.vyskocil@natur.cuni.cz

A huge diversity of problems currently solved by modern analytical chemistry requires a great variety of approaches, methods, and materials used for finding optimal solutions. Although the advantages and possibilities of current spectrometric and separation methods are fascinating, it can certainly be declared that modern electrochemical and electroanalytical methods may represent a competitive alternative, especially if they use novel electrode materials and progressive approaches. In our UNESCO Laboratory of Environmental Electrochemistry, we have recently been intensely interested in the following three types of novel electrochemical (bio)sensors: (i) silver amalgam-based electrodes – novel sensors for determination of trace amounts of biologically active organic compounds [1], (ii) nontraditional film electrodes based on a silver solid amalgam substrate [2], and (iii) novel electrochemical DNA biosensors based on various carbon transducers for detection of DNA damage [3]. The possibilities and limitations of these newly developed electrochemical sensors and biosensors, their advantages and drawbacks, their practical applications as well as their contribution in the field of contemporary analytical chemistry will be presented in this contribution to provide a detailed look at new approaches in the development of modern electrochemical (bio)sensing systems.

Financial support from the Grant Agency of the Czech Republic (Project GP13-23337P) is gratefully acknowledged.

- [1] Andrea Hájková, Jakub Hraníček, Jiří Barek, Vlastimil Vyskočil: *Electroanalysis*, 25, 295-302 (2013).
- [2] Dana Deýlová, Vlastimil Vyskočil, Jiří Barek: *Journal of Electroanalytical Chemistry*, 717, 237-242 (2014).
- [3] Andrea Hájková, Jiří Barek, Vlastimil Vyskočil: *Electroanalysis*, 27, 101-110 (2015).

1P03

VÝVOJ A APLIKÁCIA DNA BIOSENZORA ZALOŽENÉHO NA VYUŽITÍ BÓROM DOPOVANEJ DIAMANTOVEJ ELEKTRODY V OBLASTI FARMACEUTICKEJ ANALÝZY

Jana Svítková, Silvia Švikruhá, Ľubomír Švorc

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

Dôležitým aspektom pri mnohých testoch toxicity a terapeutickej hladiny je práve interakcia medzi liečivom a nukleovými kyselinami. DNA je neustále poškodzovaná obrovským množstvom faktorov, či už endogénneho alebo exogénneho pôvodu, ako napríklad fyzikálne a chemické látky, lieky, slnečné žiarenie a pod. [1].

Ako elektrochemický prevodník pre zistenie poškodenia DNA skupinou liečiv bola v našom štúdiu využívaná bórom dopovaná diamantová elektróda (BDDE). Ide o environmentálne akceptovateľnú elektródu s výbornou citlivosťou a selektivitou [2].

Pomocou biosenzora bola sledovaná interakcia imobilizovanej DNA na povrchu BDDE s vybranými liečivami v čase inkubácie od 2 do 17 minút. Študované boli štyri liečivá (amlodipín, epinefrín, penicilín V a paracetamol) a kofeín ako zástupca alkaloidov s povzbudivým účinkom na CNS. Na základe CV záznamov po inkubácii DNA/BDDE v liečivách bola vypočítaná relatívna hodnota prúdového piku ΔI_{rel} . Metóda EIS nám dala informáciu o odpore povrchu elektródy/biosenzora, na základe ktorého bolo možné charakterizovať zmeny, ktoré nastávajú pri poškodení DNA. Na potvrdenie poškodenia imobilizovanej vrstvy DNA liečivami bola vybraná DPV. Po inkubácii biosenzora vo vzorke liečiva sa s rastúcim časom menila výška signálov zvyšku guanínu a adenínu. Z výsledkov môžeme usudzovať, že dochádzalo k interkalácii liečiva

medzi vlákna DNA. Za indikáciu interkalácie môžeme považovať aj zmenu prúdovej odozvy oxidácie guanínu a pokles odporu prenosu náboja zisteného metódou EIS.

Autori ďakujú za podporu Vedeckej grantovej agentúry VEGA MŠ SR a SAV (projekt č. 1/0361/14 a 1/0051/13).

- [1] Anna Maria Oliveira-Bertt, et. al.: *Langmuir* 28, 4895-4901 (2012)
- [2] Ľubomír Švorc, Kurt Kalcher: *Sens. Actuators B* 194, 332-342 (2014)

1P04

GEOCHEMICAL CHARACTERIZATION OF AUSTRALASIAN TEKTITES IN SEARCH OF THEIR SOURCE MATERIALS AND PARENT CRATER

Jiří Mizera^{1,2}, Zdeněk Řanda¹, Jan Kameník¹

¹*Nuclear Physics Institute, The Czech Academy of Sciences, Hlavní 130, 25068 Řež, Czech Republic*

²*Institute of Rock Structure and Mechanics, The Czech Academy of Sciences, V Holešovičkách 41, 18209 Praha 8, Czech Republic*

Location of the impact site and parent crater for Australasian tektites (AAT) has remained an unanswered question for decades. The present study discusses possible location of the AAT parent crater on the basis of geochemical data for a representative set of AAT covering the main morphological types and parts of the AAT strewn field, with the help of published geochemical and isotopic data on both AAT and their potential source materials, and also assuming some ballistic, palaeogeographic, palaeoclimatic and palaeoecological constraints. Methods of instrumental neutron and photon activation analyses were used in the study for geochemical characterization of AAT samples.

The study focused particularly on three parallel tasks: 1) collecting comprehensive data for revisiting Chinese loess or its precursors as the most suitable source materials for AAT; 2) criticism of the generally accepted location of the impact to Southeast Asia (Indochina); 3) bringing supporting evidence, in addition to 1), for a hypothesis of possible location of the AAT parent crater in the arid area of Northwest China.

The study was supported by the grant 13-22351S of the Czech Science Foundation.

1P05

HYBRIDNÍ MAGNETICKÉ NANOČÁSTICE PRO KOMPLEXACE AROMATICKÝCH LÁTEK

Jakub Koktan^{1*,2}, Ondřej Kaman², Klára Řezanková¹, Helena Sedláčková¹, Michal Řezanka³, Jarmila Kuličková² a Pavel Řezanka¹

¹ Ústav analytické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6.

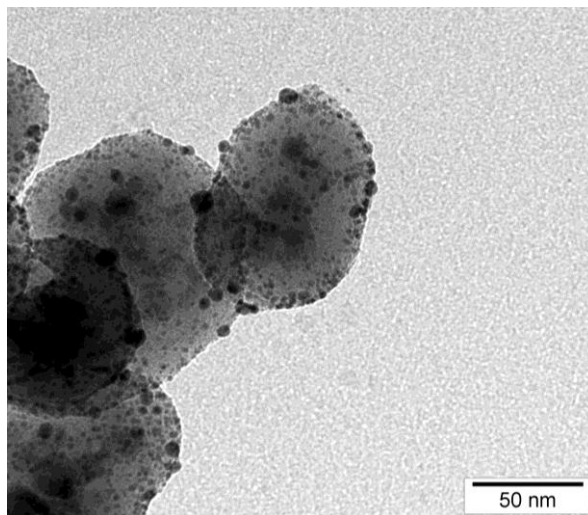
² Fyzikální ústav AV ČR, v. v. i, Na Slovance 1999/2, 182 21 Praha 8.

³ Ústav pro nanomateriály, pokročilé technologie a inovace Technická univerzita v Liberci, Studentská 1402/2, 461 17 Liberec 1.

*koktanj@vscht.cz

Vývoj nových hybridních magnetických nanočástic s dobře definovanými vlastnostmi hraje v současnosti důležitou úlohu v mnoha oblastech. Mimo jiné jsou podobné materiály vyvíjeny v oborech, jako například odpadové hospodářství nebo diagnostická a terapeutická medicína [1]. Příspěvek je věnován vývoji nových magnetických nanočástic spinelových fází [2] modifikovaných zlatem a thiolovaným cyklodextrinovým derivátem (CD-SH), makrocyclickým sacharidem s kónickou kavitou. Na tomto materiálu byla testována schopnost komplexace a separace vybraných aromatických látek ve vodném prostředí.

Magnetická jádra o složení byla připravena metodou hydrotermální syntézy. Velikost získaných krystalitů byla určena z práškové difrakce na $d_{\text{XRD}} = 9,9$ nm. Magnetická jádra byla následně obalena do vrstvy oxidu křemičitého a zlata. CD-SH byl syntetizován z β -CD přes per-6-jod-per-6-deoxy- β -cyclodextrin a následně byl imobilizován na zlatý povrch. Příprava nanočástic byla sledována transmisí elektronovou mikroskopií (TEM) a absorpční spektroskopií. Kvantitativní schopnost nanočástic vázat vybrané aromatické látky byla evaluována nepřímým stanovením koncentrací v supernatantech metodou kapilární elektroforézy [3].



Obr. 1 Mikrofotografie meziprojektu v syntéze hybridních nanočástic. Jádra spinelové fáze $\text{Mn}_{0,4}\text{Zn}_{0,6}\text{Fe}_2\text{O}_4$ jsou obaleny do oxidu křemičitého a jejich povrch je dekorován klastry zlata.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č.20/2015).

- [1] Akbarzadeh A., Samiei M., Davaran S.: *Nanoscale Res. Lett.* 7, 1 (2012).
- [2] Veverka M., Veverka P., Jiráček Z.: *J. Magn. Magn. Mater.* 322, 16 (2010).
- [3] Řezanka P., Navrátilová K., Řezanka M., Král V., Sýkora D.: *Electrophoresis* 35, 19 (2014).

1P06

MĚŘENÁ AMALGÁMOVÁ ELEKTRODA JAKO CITLIVÝ VOLTAMETRICKÝ SENZOR PRO STANOVENÍ CHEMOTERAPEUTICKÉHO LÉČIVA 5-FLUOROURACILU

Renáta Šešesovská¹, Lenka Janíková¹, Michaela Štěpánková¹, Jaromíra Chýlková¹

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

5-Fluorouracil (5-FU, 5-fluoro-1H,3H-pyrimidine-2,4-dione, CAS: 51-21-8) je fluorovaný pyrimidinový derivát, který se používá jako cytostatikum např. při léčbě zhoubných nádorů gastrointestinálního traktu, ledvin a močového měchýře nebo gynekologických nádorů. V literatuře byla popsána řada elektrochemických metod pro stanovení této látky s využitím rtuťových pracovních elektrod ve spojení s rozpouštěcí voltametrií [1, 2]. Nevýhodou rtuťových kapkových elektrod je vedle hojně diskutované

toxicity rtuti hlavne špatná mechanická odolnosť kapky, ktorá znemožňuje jej využití při měření v průtokových systémech a komplikuje přípravu jednoduchých senzorů.

Vzhľadom k tomu, že v literatúre byl popsán vznik komplexu 5-FU s mědí a jeho pozitivní vliv na stanovení tohoto léčiva [2], byly v rámci této práce testovány možnosti měděné pevné amalgámové elektrody (CuSAE) při analýze 5-FU. CuSAE může být úspěšně použita právě v případech, kdy analyt tvoří s mědí komplexy, které mohou být následně redukovány nebo oxidovány [2]. S využitím cyklické a DC voltametrie bylo studováno voltametrické chování 5-FU na CuSAE v závislosti na pH a rychlosti polarizace. Poté byly navrženy parametry rozpouštěcí diferenční pulzní voltametrie (AdS DPV) pro jeho stanovení a vypočteny základní statistické parametry (např.: LDR, LOD, LOQ). Na závěr byla navržena metoda aplikována při analýze biologický vzorků a léčiv.

Tato práce byla financována Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (projekt č. CZ.1.07/2.3.00/30.0021 "Strengthening of R&D Teams at the University of Pardubice") a Univerzitou Pardubice (projekt č. SGSFChT_2015006).

- [1] M. Khodari, M. Ghandour, A. M. Taha: Cathodic stripping voltammetry of the anticancer agent 5-fluorouracil and determination in urine. *Talanta* 44, 305-310 (1997).
- [2] V. Mirčeski, R. Gulabovski, B. Jordanoski, Š. Komorsky-Lovrić: Square-wave voltammetry of 5-fluorouracil. *J. Electroanal. Chem.* 490, 37-47 (2000).
- [3] B. Yosypchuk, L. Novotný: Copper solid amalgam electrodes. *Electroanal.* 15, 121-125 (2003).

1P07 VOLTAMETRICKÉ STANOVENÍ VYBRANÝCH ANTIOXIDANTŮ V ROPNÝCH PRODUKTECH

Markéta Tomášková¹, Jaromíra Chýlková¹, Tomáš Navrátil², Renáta Šelešovská¹

¹Univerzita Pardubice, FCHT, Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Studentská 573, 53010 Pardubice, marketa.tomaskova@upce.cz

²Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v. v. i. Dolejšova 3, 182 23 Praha 8

Spotřeba paliv a maziv má významné nejen ekonomické, ale i ekologické dopady. To jsou hlavní důvody, proč je třeba jim věnovat

náležitou pozornost. Vzhľadom ke zvyšující se kvalitě olejů se prodlužuje i doba jejich životnosti, což je nanejvýš žádoucí. Negativní vliv na kvalitu olejů představují hlavně oxidační děje [1].

Pro zpomalení oxidačních reakcí se do maziv a paliv přidávají aditiva, tzv. antioxidanty. Antioxidant je látka, jejíž molekuly omezují aktivitu kyslíkových radikálů a převádějí je do méně reaktivních stavů. Tím omezují proces oxidace v látce nebo směsích, ve kterých se vyskytují. Antioxidační účinek vyplývá ze specifické struktury těchto látek. Nejčastěji používanými jsou 2,6-di-tert-butyl-4-metylfenol (BHT), 3-tert-butyl-4-hydroxyanisol (BHA), tertbutylhydrochinon (TBHQ), propyl galát (PG) a pyrogallol (PA) [2].

Vhodná metoda stanovení antioxidantů je nezbytná pro určení a kontrolu jejich obsahu v různých typech produktů, jejich vlivu na oxidační stabilitu výrobků a rovněž při sledování jejich úbytku v závislosti na čase, což souvisí například s určením doby životnosti mazacích olejů. Voltametrická analýza je rychlá a velice citlivá. Navíc antioxidanty jsou látky, které se velmi snadno elektrochemicky oxidují [3]. Tato práce je zaměřena na vypracování metod pro analýzu vybraných antioxidantů v ropných produktech jako jsou oleje, ale také směsná motorová nafta nebo bionafta (methylester řepkového oleje).

- [1] B. Straka: Motorové oleje a tribotech. diagnostika naftových motorů, (1986)
- [2] O. Dunn: Fuel Process. Technol., (2005)
- [3] E. I. Korotkova, Y. A. Korbainov, A. V. Sheychuk: *J. Electroanal. Chem.*, (2002)

1P08 STANOVENIE BIOGENNÝCH AMÍNŮ V POTRAVINÁCH

^a Jozef Sokol, ^b Zuzana Dičáková

^aUniverzita sv. Cyrila a Metóda, Fakulta prírodných vied v Trnave, J. Herdu 2, 917 01 Trnava, jozef.sokol@ucm.sk, ^bUniverzita veterinárskeho lekárstva a farmácie, Komenského 73, 041 81, Košice, dicakova@uvlh.sk

Biogénne amíny predstavujú skupinu biologicky aktívnych látok. Sú to dusíkaté organické látky s nízkou molekulovou hmotnosťou rôznych štruktúr obsahujúcich charakteristické aminoskupiny, ako tyramín, dietylamin, fenyetylamin (monoamíny), histamín, putrescín,

kadaverín, serotonin, triptamín (diamíny) a spermin, spermidín (polyamíny). Väčšina z nich majú významný fyziologický účinok a slúžia ako zdroj dusíka a prekursor syntézy hormónov a nukleových kyselín a bielkovín. Mnohé z nich sa v malých množstvách bežne vyskytujú v potravinách rastlinného ako aj živočíšneho pôvodu a vznikajú predovšetkým vo fermentovaných potravinách a nápojoch. Vznikajú mikrobiálnou dekarboxyláciou zodpovedajúcich aminokyselín alebo amináciou a transamináciou aldehydov a ketónov. Ich prítomnosť vo zvýšených koncentráciách v potravinách môže predstavovať riziko pre ľudské zdravie z hľadiska fyziologického ako aj toxikologického, známe sú napr. alergie, hypertenzia, migréna, dýchacie ťažkosti, bolesti hlavy. Preto z uvedených dôvodov sú predmetom záujmu z hľadiska medicínskeho, potravinárskeho, ako aj analytického. Na stanovenie biogénnych amínov sa využívajú predovšetkým chromatografické metódy, a to najmä vysoko účinná kvapalinová chromatografia, ktorá bola použitá aj v práci, so separáciou na reverzných fázach a derivatizáciou pre UV detekciu. Vzorky mäsa, mäsových výrobkov a rýb boli extrahované 10% kyselinou trichlóroctovou a následne prefiltrované cez membránový filter. Ako derivatizačné činidlo bol použitý dansylchlorid. Následne vzorky boli odparené a rozpustené v acetonitrile. Separácia bola robená na kolóne s reverznou fázou Hylersil BDS C18 v mobilnej fáze 0,02M kyselina octová. Vzorky boli detegované UV-VIS detektorom pri 254 nm. Sledovalo sa sedem biogénnych amínov (tryptamín, fenyetylamin, putrescín, kadaverín, histamín, tyramín, spermidín).

. C), v rôznych vzorkách potravín a vo vzorkách telových tekutín [4,5], plynová chromatografia (GC) [4], kapilárna zónová elektroforéza (CZE) [4], a taktiež aj tenkovrstvová chromatografia [4]. Jedná sa o látky polárne neobsahujúce chromofory, musia sa používať derivatizačné techniky s použitím derivatizačných činidiel ako napr. dansylchlorid, benzoylchlorid, o-ftalaldehyd za využitia UV-VIS, alebo fluorescenčnej detekcie [1,4,6,9]. Isté možnosti ponúka aj ion-pair chromatografia s reverznou fázou alebo ionexová chromatografia [4]. Hmotnostná spektrometria (MS) sa v súčasnosti používa najviac ako veľmi spoľahlivá detekčná technika v kombinácii s HPLC alebo GC [5,7,10]. Nemenej dôležitou súčasťou sú extrakčné metódy, ktoré sa používajú na vyextrahovanie

amínov z biologických matric. Okrem bežnej extrakcie kvapalina-kvapalina [1,3] používajú sa aj metódy ako DLLME [7], extrakcia na tuhých sorbentoch (SPE) [11].

. Biogenic amines are nitrogenous bases, which occur naturally in a variety of organisms. The biogenic amines, which are often analyzed in food include: histamine, tyramine, putrescine, cadaverine, spermine, spermidine, tryptamine and phenylethylamine. Monitoring their presence and levels in food is interesting in several respects. High concentrations of histamine or tyramine may act toxic to humans. It is important to assess the content of biogenic amines in foods due to consumed dose. To estimate histamine content in foods is very important for patients suffering from histamine intolerance. Low polyamines content diet is suitable for cancer patients.

Most publications on biogenic amines deals with their occurrence in marine fish. Slovakia has no sea and therefore our research is devoted to setting histamine in fish only marginally. In the field of dairy products at our department the analysis of biogenic amines have been used, for example, for early detection of hygiene deficiencies in the processing of sheep's milk at the sheepfold. The available literary sources of biogenic amines analysis of meat and meat products dealing primarily with pork, beef and poultry meat. Our research focuses mainly on wild game meat. In meat products biogenic amines levels in the traditional way prepared products and innovative products with various additives are compared. Positive effect of some added spice extracts to the meat products was observed, which reduced the concentration of biogenic amines. In other types of food are biogenic amines estimated especially because of the decision on their suitability or unsuitability for certain groups of consumers (histamine intolerance, polyamines content).

For the detection of biogenic amines high performance liquid chromatography, ion exchange chromatography and thin layer chromatography methods are used.

Jednu z významných skupín biologicky aktívnych látok predstavujú biogénne amíny. Sú to dusíkaté organické látky s nízkou molekulovou hmotnosťou rôznych štruktúr obsahujúcich charakteristické aminoskupiny. Patria tu tyramín, dietylamin, fenyetylamin (monoamíny), histamín, putrescín, kadaverín, serotonin, triptamín (diamíny) a spermin, spermidín (polyamíny). Väčšina z nich majú významný fyziologický

účinnok a slúžia ako zdroj dusíka a prekursorzy syntézy hormónov a nukleových kyselín a bielkovín [1]. Mnohé z nich sa v malých množstvách bežne vyskytujú v potravinách rastlinného ako aj živočíšneho pôvodu a vznikajú predovšetkým vo fermentovaných potravinách a nápojoch. Vznikajú mikrobiálnou dekarboxyláciou zodpovedajúcich aminokyselín alebo amináciou a transamináciou aldehydov a ketónov [2]. Ich prítomnosť vo zvýšených koncentráciách v potravinách môže predstavovať riziko pre ľudské zdravie z hľadiska fyziologického ako aj toxikologického, známe sú napr. alergie, hypertenzia, migréna, dýchacie ťažkosti, bolesti hlavy. Preto z uvedených dôvodov sú predmetom záujmu z hľadiska medicínskeho, potravinárskeho, ako aj analytického [3]. Polyamíny sú predmetom záujmu aj ako markery nádorových ochorení, keďže majú stimulačný efekt na DNA, RNA a syntézu bielkovín [4,5]. Spermin, spermidín, putrescín a kadaverín vo veľmi malých množstvách sa nachádzajú aj v ľudskom tele. K signifikantnému nárastu ich koncentrácií v biologických tekutinách a tkanivách dochádza u pacientov s nádorovými ochoreniami [4,5]. Sledovanie biogénnych amínov je veľmi dôležité z hľadiska toxikologického, medicínskeho, ale aj potravinárskeho a technologického (fermentované potraviny) a taktiež sú dôležitým ukazovateľom kvality a čerstvosti potravín.

Problematika analýzy biogénnych amínov spadá do oblasti stopovej analýzy, keďže bežne ide o nízke koncentrácie. Na stanovenie biogénnych amínov sa využívajú predovšetkým chromatografické metódy, a to najmä vysoko účinná kvapalinová chromatografia (HPLC), v rôznych vzorkách potravín [1,3,4,6,7,8] a vo vzorkách telových tekutín [4,5], plynová chromatografia (GC) [4], kapilárna zónová elektroforéza (CZE) [4], a taktiež aj tenkovrstvová chromatografia [4]. Jedná sa o látky polárne neobsahujúce chromofory, musia sa používať derivatizačné techniky s použitím derivatizačných činidiel ako napr. dansylchlorid, benzoylchlorid, o-ftalaldehyd za využitia UV-VIS, alebo fluorescenčnej detekcie [1,4,6,9]. Isté možnosti ponúka aj ion-pair chromatografia s reverznou fázou alebo ionexová chromatografia [4]. Hmotnostná spektrometria (MS) sa v súčasnosti používa najviac ako veľmi spoľahlivá detekčná technika v kombinácii s HPLC alebo GC [5,7,10]. Nemenej dôležitou súčasťou sú extrakčné metódy, ktoré sa používajú na vyextrahovanie amínov z biologických matríc.

Okrem bežnej extrakcie kvapalina-kvapalina [1,3] používajú sa aj metódy ako DLLME [7], extrakcia na tuhých sorbentoch (SPE) [11].

1P09

MONITORING OF GRAPE WINE PRODUCTION BY NMR SPECTROSCOPY

Milan Mazúr, Katarína Furdíková, Michal. Kaliňák, Marián Valko

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

The chemical composition changes during grape wine production were monitored by NMR spectroscopy. Proton NMR spectra of the fresh must samples showed high intensive peaks of main components (fructose and glucose) and also peaks of minor compounds as malic acid and several amino acids. After alcoholic fermentation started intensive peaks of ethanol appeared in the spectra. During fermentation NMR spectra show considerable increase in the amount of ethanol as well as acetic and succinic acid. When the alcoholic fermentation is complete the final ethanol concentration is present in the spectrum of new wine. The amount of acetic and succinic acids rise slightly and lactic acid appears as well. Other compounds that are clearly evident in the spectra of grape must, grape must in fermentation ("burčiak"), young wine still fermented ("rampáš") and new wine, are alanine, proline, glycerol, tartaric acid and some other minor compounds. Presented study indicates that during the processing of grapes to new wine dominant and minor compounds varied significantly. The advantage of the proton NMR spectroscopy is the ability to follow the course of many components of wine simultaneously and the simple sample preparation.

This work was supported by the Scientific Grant Agency of the Slovak Republic (Projects VEGA 1/0765/14 and VEGA 1/0041/15) and the Slovak State Program Project No. 2003SP200280203.

1P10**IZOLACE MONONUKLEÁRNÍCH BUNĚK Z PERIFERNÍ KRVE A JEJICH DETEKCE PRŮTOKOVOU CYTOMETRIÍ U PACIENTŮ PO BARIATRICKÝCH OPERACÍCH.**

Karolína Křenková¹, Michal Haluzík², Alexandra Lochmanová³, Marek Bužga⁴

¹Ostravská Univerzita, Přírodovědecká fakulta, 30. Dubna 22, 701 00, Ostrava, korenkova@seznam.cz

²Ostravská Univerzita, Přírodovědecká fakulta, 30. Dubna 22, 701 00, Ostrava, michal.haluzik@osu.cz

³Ostravská Univerzita, Lékařská fakulta, Syllabova 19, 703 00, Ostrava, alexandra.lochmanova@osu.cz

⁴Ostravská Univerzita, Lékařská fakulta, Syllabova 19, 703 00, Ostrava, marek.buzga@osu.cz

Redukce hmotnosti je základní součástí léčby obézních diabetiků 2. typu. Terapeutický přínos bariatrických operací u tohoto nejčastějšího metabolického onemocnění prokazuje celá řada studií [1].

Mononukleární buňky představují důležitý marker, který lze využít při hodnocení některých systémových metabolických změn a patofyziologických stavů (zánětlivá reakce, kardiovaskulární onemocnění, nádorová onemocnění) provázejících obezitu a metabolický syndrom. Na základě množství mononukleárních buněk a identifikace a kvantifikace některých prozánětlivých faktorů jimi produkovaných, je možné zhodnotit pozitivní terapeutický přínos redukce hmotnosti obézních pacientů.

Metoda izolace CD14⁺ mononukleárních buněk z periferní krve je založena na využití gradientové centrifugace. Poté následuje separace CD14⁺ mononukleárních buněk na koloně s pevnou magnetickou maticí s navázaným antigenem xCD14⁺ [2].

Správnost izolačního postupu, detekce a kvantifikace CD14⁺ populace mononukleárních buněk byla ověřena a provedena průtokovou cytometrií.

U výše uvedeným způsobem izolovaných CD14⁺ mononukleárních buněk bude následně na úrovni genové exprese metodou RT-PCR sledována produkce prozánětlivých faktorů (např. IL-6, TNF-alfa, IL-12, IL-1β), a bude takto možné zhodnotit pozitivní terapeutický přínos redukce hmotnosti obézních pacientů po bariatrických operacích.

[1] FRIED, M., HAINER, V., BASDEVANT, A., et al.: Interdisciplinary European Guidelines for Surgery for Severe (Morbid) Obesity. *Obesity*

Surgery. 2007, vol. 17, p. 260-270.

[2] ZIEGLER-HEITBROCK, L.: The CD14⁺ CD16⁺ blood monocytes. *J. Leukoc. Biol.* 2007, vol. 81, p. 584-592.

1P11**VISCOSITY COEFFICIENTS B OF KCl, NaCl, NaI, NaBr, KNO₃, LiNO₃, AgNO₃, NaClO₄, NaBPh₄, Bu₄Ni AND Et₄Ni IN RICH OF WATER BINARY MIXTURES CONTAINING PROPAN-1-OL AT 298.15 K**

Zdzisław Kinart¹, Adam Bald¹

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

Aqueous-organic mixtures are very often being used in various fields of chemistry. However, the literature review shows, that is a small amount of data involving studies of viscosimetric properties of strong electrolytes in these type of solvents. Such research are carried out for many years in the Department of Physical Chemistry of the University of Lodz.

The viscosities of KCl, NaCl, NaI, NaBr, KNO₃, LiNO₃, AgNO₃, NaClO₄, NaBPh₄, Bu₄Ni and Et₄Ni were determined in H₂O – propan-1-ol (1-PrOH) mixtures (up to ca 0.15 mole fraction of 1-PrOH) as a function of concentration (0.01 to 0.05 mol dm⁻³) at T = 298.15 K to obtain the Jones-Dole B coefficient.

$$\eta_r = \frac{\eta}{\eta_o} = 1 + Ac^{1/2} + Bc$$

Using the assumption of the equality $B(Bu_4N^+) = B(BPh_4^-)$, the values of $B_{\pm}$ coefficients for individual ions have been calculated. All results have been discussed in terms of ion-solvent interactions.

Based on these data we analyzed the nature of changes in ionic value of coefficient B as a function of the composition of the studied water + propan-1-ol mixtures mainly in terms of ion - solvent interactions.

1P12**STANOVENÍ PROSTATICKEHO SPECIFICKÉHO MEMBRÁNOVÉHO ANTIGENU (PSMA) POMOCÍ KOMBINACE NANOKOMPOZITU Fe_3O_4 @AG A MAGNETICKY ASISTOVANÉ POVRCHOVĚ ZESÍLENÉ RAMANOVY SPEKTROSKOPIE**

Zuzana Chaloupková, Zdeňka Marková, Václav Ranc, Radek Zbořil

Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzity Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, Olomouc, 771 46, Česká republika, zuzana.chaloupkova@upol.cz

Karcinom prostaty je nejčastějším zhoubným nádorem u mužů v řadě vyspělých zemí světa a je po karcinomu plic nejčastějším nádorem u mužské populace. Karcinom prostaty je v současné době považován za jeden z hlavních medicínských problémů v mužské populaci. Česká republika patří mezi země s vysokým výskytem karcinomu prostaty. Ročně umírá v ČR na karcinom prostaty okolo 1 400 mužů. Přesná příčina onemocnění není jednoznačně známa (1).

Mezi základní diagnostické metody užívané při diagnostice karcinomu prostaty patří určení hladiny markerů rakoviny prostaty v séru. Mezi nejčastější marker, který je při rakoviny prostaty diagnostikován, patří PSA – díky své omezené specifitě je však jeho využití výrazně limitováno (2). Naproti tomu PSMA- prostatický specifický membránový antigen má senzitivitu stanovení 75% a specifitu 66% (3).

PSMA v praxi své uplatnění rutinně zatím nenašel. Tato práce se zabývá vývojem analytické platformy, která bude sloužit k rychlé a velmi specifické analýze PSMA pomocí magneticky asistované povrchově zesílené Ramanovy spektroskopie. Vyvinutá analytická sonda je založena na nanokompozitu Fe_3O_4 @Ag, jenž je povrchově upraven nízkomolekulárním selektorem na PSMA. Nežádoucí nespecifické interakce vyvinuté sondy byly minimalizovány pomocí dodatečného pokrytí volného povrchu nanočástic stříbra etylaminem. Magnetické vlastnosti sondy umožňují izolovat cílený marker s vysokou selektivitou. Analýza je následně prováděna metodou MA-SERS na základě přímého porovnání spektrálních pásů PSMA a referenčního standardu (adenin). Limity detekce procedury se pohybuje v oblasti $\text{pg} \cdot \text{L}^{-1}$.

Autoři děkují za podporu projektu NPU LO1305 Ministerstva mládeže, školství a tělovýchovy České republiky.

- [1] Bray F., Sankila R., Ferlay J., et al. Estimates of cancer incidence and mortality in Europe in 1995. *Eur J Cancer*, 99-166. ISSN 0959-8049, 2002.
- [2] Kolombo I., Poršová I., Zemanová I., et al. Prostatický specifický antigen (PSA) – situace v r. 2007. *Onkolog*, 2(6), 357-362. ISSN 1336-8176, 2007.
- [3] Elgamal A. A., Holmes E. H., Su S. L., et al. Prostate - specific membrane antigen (PSMA). Current benefits and future value. *Semin Surg Oncol*, 18, 10-16. ISSN 1098-2388, 2008.

1P13**DETEKCE BAKTERIÍ V KLOUBNÍCH PUNKTÁTECH METODOU POVRCHEM ZESÍLENÉ RAMANOVY SPEKTROSKOPIE**

Ariana Fargašová, Robert Pucek, Václav Ranc, Klára Černá

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

Detekce a identifikace patogenních mikroorganismů jsou důležité v mnoha oblastech jako je potravinářství, ochrana ovzduší a vod před znečištěním či k identifikaci zdroje infekce v lékařském prostředí. Velice důležitá je pak oblast ortopedická, kdy prodleva v rychlosti stanovení přítomnosti bakterie v kloubních punktátech může mít až fatální následky v podobě amputace končetin. Klasické testy přítomnosti bakterií jsou založeny na tradičních kultivačních technikách, jako je polymerázová řetězová reakce (PCR) či enzymatická metoda (ELISA), které ovšem mohou zabrat i několik hodin až dní, při současně docela vysokých detekčních limitech [1]. Nové možnosti pro detekci a identifikaci mikroorganismů nabízejí nanočástice a jejich spojení s povrchem zesílenou Ramanovou spektroskopií (SERS). Tato metoda, využívající magnetického kompozitu obsahujícího nanočástice zlata jako biosenzoru, je nejen výjimečná svou rychlostí, ale poskytuje také výrazně nižší detekční limity, než nabízejí klasické techniky [2]. Cílem této práce bylo využití diagnostického nástroje pracujícího na principu SERS detekce patogenních bakterií (*Staphylococcus aureus*) při stanovení bakteriální infekce kloubních náhrad.

Tato práce vznikla za podpory projektu LO1305 Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky a vnitřního grantu Univerzity Palackého v Olomouci (PrF_2015_022).

- [1] N. Gilmartin, R. O'Kennedy: Enzyme Microb. Technol., (2012)
- [2] L. Zhang, J. Xu, L. Mi, H. Gong, S. Jiang and Q. Yu: Biosens. Bioelectron., (2012)

1P14

M/CNTs KATALYZÁTORY PRE OPTIMALIZÁCIU PYROLÝZNEJ KONVERZIE METÁNU NA VODÍK.

Branislav Erdelyi^{1,3}, Renáta Oriňáková¹, Andrej Oriňák¹, Dušan Velič², Vladimír Girman³

¹Katedra fyzikálnej chémie, PF UPJŠ v Košiciach, Moyzesova 11, 041 54 Košice,

²Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, UK v Bratislave, 842 15 Bratislava 4, Mlynská dolina

³Ústav fyzikálnych vied, Park Angelium 9, 040 01 Košice

Nanočastice majú vysoký potenciál uplatnenia v katalýze, pretože atómy, ktoré sú na povrchu vykazujú vysokú afinitu pre vytváranie väzieb a poskytujú dostatok voľných atómov pre priebeh reakcie. Samotné nanočastice je vhodné stabilizovať naviazaním na určitom nosiči. Študovali sme katalytickú aktivitu kov/uhlíkových nanorúrok (M/CNTs) v pyrolýznej konverzii metánu na vodík. Všetky katalyzátory boli pripravené bezprúdovým vylučovaním kovov na aktivovaný povrch CNTs, tzv. mokrá impregnačná metóda, kde ako redukčné činidlo bol použitý formaldehyd [1-3]. Najlepšia počiatočná hodnota konverzie metánu (86%) bola dosiahnutá aplikáciou Ni/CNTs pri 900°C, kde tento katalyzátor naakumuloval 14,5 g uhlíkového depozitu na gram katalyzátora (g_C/g_{kat}) a prahová teplota (T_p) priebehu konverzie metánu na vodík bola 440°C. NiCuCNTs katalyzátor pri 900°C naakumuloval až 34,2 g_C/g_{kat} , najlepšia dosiahnutá počiatočná konverzia metánu bola 61% a T_p 625°C. ZnCuCNTs katalyzátor pri 900°C naakumuloval 10,3 g_C/g_{kat} , počiatočná konverzia bola 49% a T_p 745°C. S ZnCNTs a CuCNTs katalyzátormi boli dosiahnuté nízke konverzie metánu a nevýrazné kumulácie uhlíkového depozitu. Práve akumulačná schopnosť katalyzátora poskytuje informáciu o jeho životnosti a efektívnosti, hoci počiatočné hodnoty konverzie pri danej teplote nie sú veľmi vysoké. Pripisuje sa to synergickému efektu kovov a CNTs v danom kompozite.

Tato práce vznikla za podpory grantu VEGA 1/0211/12.

- [1] Roduner E. The Royal Soc. of Chemistry. 35, 583 (2006)
- [2] Tavasoli A. Taghavi S. J. Energy Chemistry. 22, 747 (2013).
- [3] Su SH. Chiang WT. Lin ChCh. Yokoyama M. Physica E. 40, 2322 (2008)

1P15

INHIBÍCIA PROLIFERÁCIE BUNIEK NA NANOOBJEKTIVOM HYBRIDNOM SUBSTRÁTE

Ján Macko^{1,2}, Renáta Oriňáková², Andrej Oriňák², Jana Vargová³, Denisa Harvanová⁴, Jozef Radoňák⁵

¹Prírodovedecká fakulta UK v Bratislave, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava 4, jmacko10@gmail.com

²Prírodovedecká fakulta UPJŠ v Košiciach, Katedra fyzikálnej chémie, Moyzesova 11, 041 54 Košice

³Prírodovedecká fakulta UPJŠ v Košiciach, Katedra bunkovej biológie, Moyzesova 11, 041 54 Košice

⁴Združená tkanivová banka UPJŠ a UNLP v Košiciach, Tr. SNP 1, 040 11 Košice

⁵I. chirurgická klinika UPJŠ LF a UNLP, Tr. SNP 1, 040 11 Košice

Jednoduchou kombináciou metód elektrochemickej depozície a spin – coatingu sme pripravili nanoobjektové hybridné substráty s významným vplyvom na inhibíciu proliferácie adherentných buniek. Hybridné substráty bol pripravované v dvoch krokoch. Prvým krokom bolo elektrochemické vylúčenie vrstvy niklu, v nasledujúcom kroku bola na niklový film nanosená tenká vrstva príslušného polyméru [1]. Inhibícia proliferácie bola pozorovaná pri kultivovaní buniek dvoch vybraných línii na hybridných substrátoch s príslušným polymérom. Bol zistený významný vplyv prítomnosti nanoštruktúrovaného niklového filmu na nárast celkovej hydrofóbnosti pripraveného hybridného substrátu a aj na celkový priebeh rastu a proliferácie buniek oboch testovaných línii. Potvrdila sa aj závislosť miery inhibície rastu buniek v závislosti na hydrofobicite testovaného povrchu.

Získavanie poznatkov o modulácii adhézie buniek na nanoobjektových substrátoch vysoký potenciál a možnosti širokého uplatnenia v medicínskej praxi, ako napr.: príprava biokompatibilných implantátov, výroba antimikrobiálnych povrchov, ale existujú aj možnosti využitia takýchto

povrchov pri ranej diagnostike kancerogénnych ochorení [2].

Táto práca vznikla za podpory VEGA 1/0211/12, APVV -0280-11.

- [1] KWON K. W., CHOI S. S., LEE S. H., KIM B., LEE S. N., PARK M. C., KIM P., HWANG S. Y., SUH K. Y.: *LabChip* 7, (2007).
- [2] HALL D. B., UNDERHILL P., TORKELOSON J. M.: *Polymer Engineering and Science* 38, 12 (1998).

1P16

NANOFORMULACE RIFAMPICINU V LÉČBĚ MULTIREZISTENTNÍ TUBERKULÓZY: PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE

Jiří Trousil, Sergey Filippov, Martin Hrubý, Bedřich Porsch, Petr Štěpánek

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

Současný problém, který spadá do oblasti infekčních chorob, dnes představují tzv. multirezistentní bakteriální kmeny. Ukazuje se totiž, že řada dříve účinných terapií antibiotiky, resp. chemoterapeutiky je u těchto kmenů díky zvýšené rezistenci méně účinná nebo neúčinná. Příkladem kmenů, které vykazují multirezistivitu, jsou kmeny *Mycobacterium tuberculosis* nebo *Staphylococcus aureus* aj..

Ztížená léčitelnost tuberkulózy je navíc dána těžko proniknutelným obalem těchto bakterií tvořenými hydrofobními mykolovými kyselinami a faktem, že část bakteriálních buněk se nachází uvnitř makrofágů.

Relativně novým přístupem je využití nanočásticových lékových forem antituberkulotik podávaných inhalačně, přičemž léčivá látka vstupuje do krevního řečiště přes alveolární epitel. Nanorozměry jsou v tomto případě voleny mimo jiné z toho důvodu, že proniknutelnost inhalovaných částic je determinována jejich rozměry.

Předmětem této aktuálně řešené studie je vývoj terapeutického systému založeného na rifampicinu (antituberkulotikum) enkapsulovaném do biokompatibilních a biodegradovatelných polymerních nanočástic, jeho charakterizace rozptylovými technikami a nalezení elegantního způsobu pro simulaci jeho interakce s makrofágy, resp. buňkami *M. tuberculosis*.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA MŠK(CZ) 7F14009.

1P17

OXIDACE FLAVONOLIGNANŮ A JEJICH INTERAKCE S DNA A PROTEINY

Martina Zatloukalová¹, Michaela Pyszková¹, Vladimír Křen², Jitka Ulrichová¹, Jan Vacek¹

¹*Ústav lékařské chemie a biochemie, Lékařská fakulta, Univerzita Palackého, Hněvotínská 3, Olomouc 775 15*

²*Mikrobiologický ústav AV ČR, Videňská 1083, Praha 142 20*

Byly studovány antioxidační a prooxidační vlastnosti flavonolignanů silybinu, silydianinu, silychristinu, hlavních komponent standardizovaného extraktu ze semen ostropestřce mariánského, a jejich dehydroderivátů. Oxidace flavonolignanů probíhá víceetapově a je závislá na pH prostředí. 2,3-dehydroderiváty se díky reaktivní hydroxylové skupině na uhlíku 3 snadněji oxidují. Jsou tedy reaktivnější a účinnějšími antioxidanty v porovnání se silybinem, silydianinem a silychristinem. Flavonolignany a jejich deriváty reagují nekovalentní interakcí s deoxyribonukleovými kyselinami (DNA), tvoří reaktivní komplexy s ionty přechodných kovů, které mohou poškozovat DNA tvorbou aduktů nebo sekundární produkcí volných radikálů. V přítomnosti volných radikálů dochází k oxidativnímu poškození a fragmentaci DNA. Získané výsledky přinesly nové poznatky o reaktivitě, stabilitě, antiradikálových resp. antioxidačních a prooxidačních vlastnostech flavonolignanů, a charakteru jejich interakce s biomakromolekulami.

Práce byla financována GAČR (15-030378), interním grantem UP (IGA_LF_2015_007), COST (LD14033).

1P18

ELEKTROCHEMICKÁ MODIFIKÁCIA TLAČENÝCH UHLÍKOVÝCH ELEKTROD FUNKČNÝMI KOVOVÝMI NANOČASTICAMI

Lenka Škantárová¹, Renáta Oriňáková¹, Andrej Oriňák¹

¹*Katedra fyzikálnej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11, 040 01 Košice, lenka.skantarova@upjs.sk, renata.orinakova@upjs.sk, andrej.orinak@upjs.sk*

Technika sieťotlače, prevzatá okolo roku 1990 z mikroelektronického priemyslu, predstavuje

jeden z najlepšie zvládnutých grafických reprodukčných procesov, ktoré sú dnes známe. Pri správnom použití procesu sieťotlače je možné dosiahnuť presné a opakovateľné výsledky a seriovo pripraviť extrémne lacné, spoľahlivé a vysoko citlivé senzory na jedno použitie.

Tlač rôznych vzorov navrhnutých analytikom v súlade s cieľovým využitím tlačených elektród predstavuje výhodnú alternatívu voči tradičným elektródam, čím odpovedá na rastúcu potrebu vykonať rýchle "in situ" analýzy v reálnych vzorkách i v stopových množstvách.

Veľká všestrannosť tlačených elektród spočíva v širokej škále spôsobov, ktorými môžu byť elektródy modifikované. Vyrobené elektródy môžu byť modifikované imobilizovaním alebo elektrolytickým vylúčením rôznych látok, akými sú kovové filmy, polyméry, enzýmy, komplexotvorné činidlá, ligandy a pod. na povrchu elektród.

Enzýmami modifikované tlačené elektródy možno využiť pri elektrochemickej detekcii alkoholov, cholesterolu, glukózy, peroxidu vodíka, aj pri environmentálnej analýze pesticídov, herbicídov a ťažkých kovov¹⁻³.

Nanočasticami modifikované tlačené elektródy sa vyznačujú celkovou stabilitou a vytvárajú zdrsnené vodivé rozhranie, a tak vďaka nezvyčajným schopnostiam dokážu na seba naviazať cieľové molekuly.

Kombinácia elektrochemických metód s katalyticky aktívnymi nanočasticami znamená významný krok smerom k lepšej citlivosti, dlhšej stabilite bioprvkov v biosenzoroch a novým možnostiam detekcie pre následnú aplikáciu v miniaturizovaných zariadeniach.

Autori ďakujú za finančnú podporu Vedeckej a grantovej agentúry Ministerstva školstva SR (1/0211/12) a za finančnú podporu z projektov VVGS-2014-465 a VVGS-2014-187.

- [1] Olga Domínguez Renedo, M. Asunción Alonso-Lomillo, M. Julia Arcos Martínez, Talanta 73, (2007), 202-219.
- [2] Jeffrey D. Newman, Steven J. Setford, Molecular Biotechnology 32, (2006), 249 - 268
- [3] Sergio Marín, Arben Merkoçi, Electroanalysis 24, (2012), 459-469

PREDNÁŠKY - SEKCIA 2: ANORGANICKÁ A MATERIÁLOVÁ CHÉMIA

2P01

KORÓZNE VLASTNOSTI HEXAHYDRÁTU DUSIČNANU HOREČNATÉHO

Vladimír Danielik¹, Peter Šoška¹, Jana Jurišová¹

¹ Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov, FCHPT STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, vladimir.danielik@stuba.sk

Jednou z hlavných nevýhod obnoviteľnej energie je jej nekonštantná produkcia. Zatiaľ čo z fosílnych palív môžeme získať energiu na požiadanie spálením, väčšina produkcie obnoviteľnej energie závisí od prijateľných podmienok počasia. Energia môže byť efektívne uskladnená v taveninách v podobe tepla. Systémy využívajúce latentné teplo na prenos energie majú zvyčajne veľkú energetickú hustotu (množstvo energie uskladnenej na jednotku objemu) oproti systémom s priamym ohrevom materiálu. Kým

tepelné vlastnosti (entalpia topenia, tepelná kapacita, nárast podchladenia pri opakovaných cykloch topenia/tuhnutia a i.) sú predmetom pomerne rozsiahleho výskumu, korózne vlastnosti týchto médií sa doteraz v dostupnej literatúre neštudovali. V tejto práci sme sa ako akumuláčnemu médiu venovali hexahydrátu dusičnanu horečnatého, ktorý sa topí vo svojej kryštálovej vode pri teplote okolo 85 °C. Merala sa korózna odolnosť vzoriek hliníka, medi a ocele pomocou úbytkov hmotností v roztavenom Mg(NO₃)₂·6H₂O bez a s prídavkom 0,5 hm. % Mg(OH)₂ pri teplote 94 °C.. Mechanizmus korózie a korózne produkty sa analyzovali pomocou EIS, SEM a RTG. Zistilo sa, že dané korózne prostredie je veľmi agresívne pre všetky skúmané materiály, korózna rýchlosť sa pohybovala v rozmedzí 5,5 μm rok⁻¹ pre med' až po 9,3 μm rok⁻¹ pre oceľ. Prídavok hydroxidu horečnatého zvyšoval rýchlosť korózie.

Táto práca bola realizovaná vďaka finančnej podpore grantu VEGA 1/0101/14.

2P02

VYUŽITÍ KOMPOZITU NA BÁZI REDUKOVANÉHO GRAFEN OXIDU A ZLATÝCH NANOČÁSTIC PRO SUZUKI REAKCE A OXIDATIVNÍ ESTERIFIKACE

Radka Králová,¹ Anuj K. Rath,¹ Manoj B. Gawande,¹ K.K.R. Datta,¹ Václav Ranc,¹ Rajender S. Varma,² Libor Kvítek,¹ Radek Zbořil¹

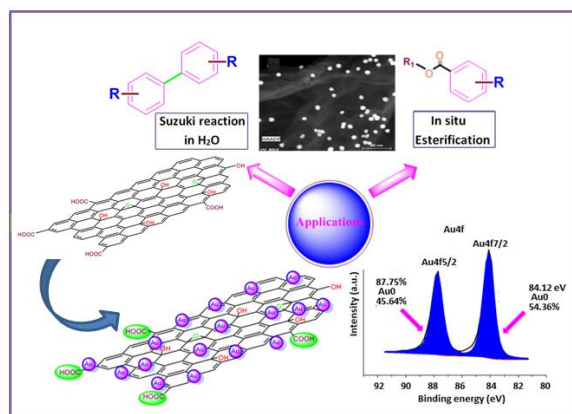
¹Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 77146 Olomouc, Česká republika.

²Sustainable Technology Division, National Risk Management Research Laboratory, US Environmental Protection Agency, 26 West Martin Luther King Drive, MS 443, Cincinnati, Ohio, 45268, USA.

Email: radka.kralova@upol.cz

Grafen oxid je nevodivý hydrofilní uhlíkový materiál, který obsahuje významné funkční kyslíkové skupiny. Tyto funkční skupiny poskytují na jeho povrchu reaktivní místa pro vhodnou modifikaci, např. kovovými nanočásticemi, a umožňují také následnou disperzi ve vodném prostředí [1]. Vedle potenciálních aplikací, využití pro detekci látek, ukládání energie a vodíku či sanace životního prostředí, mohou nanočástice kovů deponované na grafen oxidu zvyšovat katalytickou aktivitu díky výskytu mnoha povrchově aktivních míst [2]. Strukturálně integrované nanočástice kovového zlata poskytují zajímavé možnosti v případě využití grafen oxidu jako substrátu a jeho následné aplikaci v organické katalýze [3].

Kompozit zlatých nanočástic deponovaných na grafen oxidu (Au/rGO) byl připraven jednoduchým postupem založeném na redukcí grafen oxidu a zlatitého komplexu citrátem sodným. Daný kompozitní materiál Au/rGO obsahuje zlaté nanočástice sférického tvaru o velikostech v rozmezí 10-13 nm s následným využitím jako katalyzátoru pro heterogenní organickou katalýzu. Účinnost katalyzátoru byla sledována pro Suzuki Miyaura kopulační reakci ve vodném prostředí a pro in-situ oxidativní esterifikaci aldehydů v prostředí kyslíkové atmosféry. S ohledem na vysokou recyklovatelnost katalyzátoru a vysokou výtěžnost byla upřednostňována především eliminace toxických organických rozpouštědel a zamezení použití drahých ligandů pro vybrané reakce.



The authors gratefully acknowledge the support by the project LO1305 and CZ.1.07/2.3.00/30.0041 of the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic and by Internal Grants of Palacky University in Olomouc (PrF_2015_022).

- [1] Georgakilas, V.; Otyepka, M.; Bourlinos, A. B.; Chandra, V.; Kim, N.; Kemp, K. C.; Hobza, P.; Zboril, R.; Kim, K. S. *Chemical Reviews* **2012**, *112*, 6156-6214.
- [2] Ma, R.; Sasaki, T. *Accounts of Chemical Research* **2015**, *48*, 136-143.
- [3] Schniepp, H. C.; Li, J.-L.; McAllister, M. J.; Sai, H.; Herrera-Alonso, M.; Adamson, D. H.; Prud'homme, R. K.; Car, R.; Saville, D. A.; Aksay, I. A. *The Journal of Physical Chemistry B* **2006**, *110*, 8535-8539.

2P03

APLIKACE NANOČÁSTIC V AKTIVNÍCH OBALOVÝCH FOLIÍCH

Libor Kvítek¹, Aleš Panáček¹, Robert Prucek¹, Libor Machala¹, Michal Křížek², Jiří Pechoušek², Alice Tesaříková Svobodová³, Dagmar Měřinská³

¹RCPTM a Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, 17. listopadu 12, 77146, Olomouc, libor.kvitek@upol.cz

²RCPTM a Katedra experimentální fyziky, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, 17. listopadu 12, 77146, Olomouc, libor.machala@upol.cz

³Ústav inženýrství polymerů, Fakulta technologická, Univerzita Tomáše Bati, Vavrečkova 5669, 76001 Zlín, merinska@ft.utb.cz

Nanotechnologie pronikají postupně do běžného života lidí v podobě výrobků denní potřeby, jejichž užité vlastnosti jsou povýšeny díky unikátním fyzikálně chemickým a biologickým vlastnostem nanomateriálů. Zcela typický příklad aplikace nanomateriálů ve výrobcích běžné spotřeby představují nanočástice stříbra, které jsou díky jejich vysoké biologické aktivitě používány zejména pro antimikrobiální ošetření povrchů funkčních textilií [1]. V tomto případě se

jedná zejména o zvýšení komfortu uživatele z hlediska minimalizace péče o příslušný výrobek, včetně minimalizace nepříjemných kosmetických projevů mikrobiální kontaminace textilního povrchu. Existují však i velmi seriózní oblasti použití takto upravených textilních materiálů, kam lze zahrnout zejména obvazové materiály, snižující riziko mikrobiální infekce nejen špatně se hojících poranění kůže. Existují však i další kovové nanomateriály, jejichž uplatnění v praxi ale není tak dobře viditelné jako v případě nanočástic stříbra. Nanočástice železa, kovů ne tak ušlechtilého jako je zmíněné stříbro, díky své vysoké reaktivitě vystupují jako velmi silné redukční činidlo, jehož oxidačním produktem je netoxický oxid či ve vodném prostředí hydratovaný oxid železitý. Ohromná redukční síla nanočástic železa a obrovská sorpční kapacita vznikajícího oxidu zaručují jejich vysoký potenciál pro využití v environmentálních technologiích zejména tam, kde tradiční sanační technologie selhávají [2].

Velmi zajímavou oblast aplikace nanotechnologií v praxi představují obalové materiály. Nanočástice zvyšují jejich užité vlastnosti při současné úspoře energie a hmoty při jejich výrobě. Funkční obaly chrání balený výrobek dokonaleji před vnějšími vlivy než klasické obalové materiály, aniž by zásadně rostly náklady na jejich výrobu. Již zmíněné nanočástice stříbra mohou ochránit obal před mikrobiální kontaminací při manipulaci při skladování i prodeji. Nanočástice železa pak díky své reaktivitě udržují nízkou hladinu kyslíku uvnitř obalu a prodlužují tak dobu skladování rychle se kazících potravin. Zpracování uvedených nanomateriálů do polymerů používaných při výrobě obalových fólií ale představuje složitý technologický problém. Nanočástice stříbra lze velmi snadno připravit chemickou redukcí stříbrné soli z jejího vodného roztoku, ovšem vodná disperze není jednoduše aplikovatelná pro kompaundaci stříbrných nanočástic do nepolárních polymerních materiálů jako je polyetylen, které jsou nejčastěji používány pro výrobu obalových fólií. Koncentrace částic, výběr stabilizátoru i obsah vody ve výsledné disperzi zásadně ovlivňují rovnoměrné rozptýlení nanočástic ve hmotě polymeru. Zcela odlišný problém představuje kompaundace nanočástic železa do polymeru pro výrobu obalových fólií. Díky jejich vysoké reaktivitě při přímém kontaktu se vzduchem dochází k rychlé oxidaci až shoření nanočástic. V kapalně (nevodné) disperzi pro

změnu díky magnetickým interakcím vznikají pevné agregáty, špatně dispergovatelné v polymeru. Zásadní tak je pro úspěšnou kompaundaci opět výběr vhodného stabilizátoru nanočástic při minimalizaci obsahu organického rozpouštědla v disperzi, použité pro modifikaci polymerního materiálu pro obalovou fólii. Řešení těchto problémů přípravy kompozitních materiálů, kombinujících unikátní fyzikálně chemické a biologické vlastnosti kovových nanomateriálů s výhodnými vlastnostmi polymerních materiálů pro obalové fólie, představují složitý ale zajímavý chemicko-technologický problém, jehož možná řešení představuje tento příspěvek.

Tento příspěvek vzniknul za finanční podpory grantu agentury TAČR č. TA03010799 Využití nanomateriálů a přírodních extraktů jako funkčních látek ve vývoji aktivních obalových materiálů s bariérovým efektem, antimikrobiálním, protektivním a kyslík pohlcujícím efektem.

[1] Maja Radetic: JMaterSci, 48, 95-107 (2013)

[2] Jana Soukupová, Radek Zbořil, Ivo Medřík et al.: ChemEngJ, 262, 813-822 (2015)

2P04

ZVÝŠENÍ ANTIBAKTERIÁLNÍ AKTIVITY ANTIBIOTIK KOMBINACÍ S NANOČÁSTICEMI STŘÍBRA VŮČI MULTIREZISTENTNÍM BAKTERIÍM

Aleš Panáček¹, Monika Smékalová¹, Renata Večeřová², Milan Kolář², Robert Prucek¹, Libor Kvítek¹ a Radek Zbořil¹

¹Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palckého v Olomouci, 17. listopadu 12, 77146 Olomouc

²Ústav mikrobiologie, Lékařská fakulta, Univerzita palckého v Olomouci, Hněvotínská 5, 77515, Olomouc

Unikátní fyzikálně-chemické vlastnosti nanoskopických částic jsou příčinou současného dynamického rozvoje nanotechnologií v mnoha oblastech chemie, biologie, fyziky či medicíny. Typickým příkladem jsou nanočástice stříbra, které mimo jiné nachází uplatnění v antibakteriálních aplikacích [1]. Baktericidních účinků stříbra využívá lidstvo po staletí a např. sulfadiazin stříbrný je předepisován k eliminaci lokálních bakteriálních infekcí i v současné medicíně. Počátkem 20. století byly nanočástice stříbra hojně využívány v léčbě bakteriálních infekcí, nicméně s objevem penicilinu a nástupem klasických antibiotik přestaly být dále využívány.

Jistou renesancí v boji proti bakteriím zažívají nanočástice stříbra v posledních 10 letech díky rezistenci bakterií vůči antibiotikům. Téměř osmdesátiletá éra klasických antibiotik se díky odolnosti bakterií pravděpodobně blíží ke svému konci. Odhaduje se, že klasická antibiotika bude možné užívat ještě přibližně 20 let, přičemž prozatím nebyl vyvinutý žádný jiný účinný lék. Otázkou zůstává, jaká by mohla být role nanočástic stříbra právě v době bakteriální resistance a v době hledání nové účinné látky. Varianta náhrady antibiotik nanočásticemi stříbra není příliš reálná vzhledem k jejich možným nežádoucím účinkům [2]. Nicméně poslední vědecké výzkumy ukazují, že společný účinek velmi nízkých koncentrací nanočástic stříbra a klasických antibiotik by problém bakteriální resistance mohl překonat a minimálně tak prodloužit éru užívání antibiotik [3].

Tato práce vznikla za finanční podpory projektu LO1305 Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky, projektu 15-22248S Grantové agentury České republiky a projektu PrF_2015_02 Univerzity Palackého v Olomouci.

- [1] Ales Panacek, Libor Kvitek, Robert Prucek et al.: J. Phys. Chem. B, (2006)
- [2] Ales Panacek, Milan Kolar, Renata Vecerova et al.: Biomaterials, (2009)
- [3] Ashley N. Brown, Kathryn Smith, Tova A. Samuels et al.: Appl. Environ. Microbiol., (2012)

2P05

VLIV UHLIČITANŮ OBSAŽENÝCH V SORPČNÍCH MATERIÁLECH PŘI SORPCI TĚŽKÝCH KOVŮ

Martin Mucha¹

¹Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita v Ostravě, 30. dubna 22, 70103 Ostrava

Sorpce kationtů těžkých kovů na různé druhy sorbentů jsou dnes velmi široce studovanou oblastí. Nezastupitelné místo mezi sorbenty mají silikátové materiály, ať už přírodního původu (např. bentonit) [1] nebo antropogenního původu (např. strusky) [2]. Bentonity i strusky mohou obsahovat různé množství různých forem uhličitánů, nejčastěji se vyskytují alotropické modifikace CaCO₃. Při studiu sorpce kationtů kovů na strusky bylo zjištěno, že na odstranění těchto kationtů ze sorpčního roztoku mají vliv i obsažené uhličitany. Tato studie se zabývá vlivem uhličitánových minerálů na interakci mezi sorbentem (bentonit, vysokopecní a ocelářská struska) a Cu²⁺ ionty ve vodném prostředí. Interakce byly studovány metodou infračervené

spektroskopie (FTIR). Byl sledován především vliv kontaktního času a koncentrace měďnatých iontů. U strusek bylo zjištěno, že vliv uhličitánových minerálů se projevuje především při delších kontaktních časech. Měďnaté ionty jsou schopné tvořit nerozpustné hydroxo- a karbonato-komplexy, příp. hydroxidy a uhličitany a jsou ve formě těchto sloučenin odstraněny ze sorpčního roztoku, přičemž je zároveň posunuta rovnováha rozpouštění uhličitánových minerálů z materiálu (v důsledku spotřeby uhličitánových aniontů z roztoku). Množství uhličitánů v sorbentu tak klesá, což bylo potvrzeno FTIR spektroskopii. Zároveň bylo zjištěno, že množství odstraněných uhličitánů je přímo úměrné počáteční koncentraci iontů Cu²⁺ v sorpčním roztoku.

Tato práce byla podpořena projektem TEWEP Národního programu udržitelnosti I Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR reg. č. LO1208.

- [1] Jiaxing Li et al: Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects. 349 (2009), s. 195-201.
- [2] S. V. Dimitrova, D. R. Mehanjiev: Water research 34 (2000), s. 1957-1961.

2P06

ODSTRANĚNÍ ARSENU Z VODNÉHO PROSTŘEDÍ POMOCÍ ŽELAZANŮ

Robert Prucek¹, Jan Kolařík¹, Jiří Tuček¹, Rajender S. Varma², Virender K. Sharma³, Radek Zbořil¹

¹Regional Centre of Advanced Technologies and Materials, Departments of Physical Chemistry and Experimental Physics, Faculty of Science, Palacký University, Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc, Czech Republic

²Sustainable Technology Division, National Risk Management Research Laboratory, U.S. Environmental Protection Agency, 26 West Martin Luther King Drive, MS 443, Cincinnati, Ohio 45268, United States

³Department of Environmental and Occupational Health, School of Public Health, Texas A&M University, 1266 TAMU, College Station, Texas 77843, United States

Pro životní prostředí jsou arsen a jeho sloučeniny velkou hrozbou, protože vykazují značné toxické účinky.¹ Vlivem lidské činnosti se arsen vyskytuje ve všech sférách životního prostředí. Uplatnění našel v různých odvětvích, např. ve farmakologii, hornictví, zemědělství, sklářství a také v elektronice. Nejrizikovější je znečištění podzemní i povrchové vody.² Arsen se vyskytuje hlavně ve formě arsenitanů – As(III) a

arseničnanů – As(V). Arsenitany jsou toxičtější a mobilnější než arseničnany, a proto je výhodné je oxidovat na méně toxický As(V). Existuje několik technik k odstraňování arsenu z vody. Mezi tyto techniky patří např. iontová výměna, reverzibilní osmóza nebo membránová filtrace. Největší užití však našla adsorpce arsenu na sorbenty.

Železan draselný (K_2FeO_4) vykazuje silné oxidační účinky. Redoxní potenciál K_2FeO_4 je v kyselém prostředí cca 2,2 V a v zásaditém prostředí je cca 0,72 V. Železo v oxidačním stavu +VI je při reakci s vodou rychle redukováno na oxidační stav +III. Při této reakci vzniká také oxid železitý sloužící jako dobrý adsorbent.³

Cílem práce je stanovení efektivity odstranění arseničnanů a arsenitanů pomocí K_2FeO_4 včetně studia mechanismu jejich odstranění za využití rozličných experimentálních technik (Mossbauerova spektroskopie, XPS, TEM a magnetizačních technik).

Tato práce vznikla za podpory projektů OP VaVpI reg. číslo CZ.1.05/2.1.00/03.0058, TAČR TE01020218 a vnitřního grantu UP Olomouc (PřF_2015_022).

- [1] Greenwood, N. N. & Earnshaw, A.: Chemistry Elements, (1989).
- [2] Smith, E., Naidu, R. & Alston, A. M.: Advances in Agronomy, 149–195, 64, (Academic Press, 1998).
- [3] Jiang, J. Q. Advances in the development and application of ferrate(VI) for water and wastewater treatment. J. Chem. Technol. Biotechnol. 2014, 89, 165–177

2P07

ODSTRANĚNÍ KOVŮ Z VODNÉHO PROSTŘEDÍ POMOCÍ FERÁTU(VI): STUDIUM KINETIKY A MECHANISMU.

Jan Kolařík¹, Robert Pucek¹, Jiří Tuček¹, Ivana Hušková¹, Jan Filip¹, Virender K. Sharma², Radek Zbořil¹

¹Regional Centre of Advanced Technologies and Materials, Departments of Physical Chemistry and Experimental Physics, Faculty of Science, Palacký University, Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc, Czech Republic

²Department of Environmental and Occupational Health, School of Public Health, Texas A&M University, 1266 TAMU, College Station, Texas 77843, United States

Těžké kovy jsou využívány v mnoha odvětvích lidské činnosti. Uplatnění nachází v každodenním životě, v těžkém průmyslu či energetice. Toxické účinky mnohých sloučenin těžkých kovů jsou

velmi dobře známy. To přináší obrovský problém se znečištěním všech sfér životního prostředí. Největším rizikem je pak znečištění vodních zdrojů. Z těchto důvodů bylo testováno mnoho různých technik k odstranění těžkých kovů z životního prostředí, jako jsou membránové filtrace, reverzibilní osmóza či adsorpce. Poslední zmiňovaná technika našla největší uplatnění díky vysoké efektivitě a nízké ceně. Jako sorbent byly testovány různé přírodní a systetizované materiály na bázi železa, hliníku a dalších.

V posledních několika letech jsou intenzivně testovány materiály s obsahem železa ve vyšším oxidačním stupni – feráty. Tyto sloučeniny mají velký potenciál v problematice čištění vod díky šetrnosti k životnímu prostředí, vysoké sorpční efektivitě a silným oxidačním účinkům.

Cílem této práce je stanovení efektivity odstranění iontů kovů (Cu^{2+} , Co^{2+} , Ni^{2+} , Cd^{2+} , Al^{3+}) pomocí K_2FeO_4 – ferátu(VI), včetně vlivu hodnoty pH a studia mechanismu odstranění pomocí technik jako je AAS, Mossbauerova spektroskopie, XPS, TEM a magnetizačních technik.¹

Tato práce vznikla za podpory projektů CZ.1.07/2.3.00/20.0058, CZ.1.07/2.3.00/20.0155, TE01020218, LO1305 a PřF 2015_02).

- [1] Pucek, R.; Tuček, J.; Kolařík, J.; Hušková, I.; Filip, J.; Varma, R. S.; Sharma, V. K.; Zbořil, R. Environ. Sci. Technol. 2015, 49, 2319–2327.

2P08

STRUCTURAL STUDY AND CATALYTIC ACTIVITY OF NEW MN(III) AND FE(III) DIPICOLINATE COMPLEXES

M. Koman¹, R. Uhrecký¹, J. Moncol¹, J. Derco²

¹Department of Inorganic Chemistry, Slovak Technical University, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia, marian.koman@stuba.sk

²Department of Environmental Engineering, Slovak Technical University, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia

Pyridinecarboxylato complexes have been widely investigated in recent years due to their interesting coordination chemistry, allowing unusual structural features and leading to various physical and chemical properties. Pyridinecarboxylic acids are present in many natural products, such as alkaloids, vitamins and enzymes, so their metal complexes can be used as models in many research fields. The dicarboxylic acid analogue especially pyridine-2,6-dicarboxylic acid (dipicolinate acid) is one of the

most suitable ligand systems for modeling potential metallo-pharmaceutical compounds because of the low toxicity, amphiphilic nature and diverse biological activities. From structural point of view the derivatives of dipicolinate acid present 21 types of coordination modes. In this lecture we report the structural characterization of a new Manganese(III) and Iron(III) dipicolinate complexes with selected cations of pyridinecarboxamides. For testing degradation reaction of waste water were used compounds $(\text{H}_5\text{O}_2)[\text{Fe}(\text{dipic})_2]$ and $(\text{H}_3\text{O})_2[\text{Mn}(\text{dipic})_2]_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$.

Acknowledgements:

Grant Agencies (Slovakia: APVV-14-0078 and VEGA 1/0056/13) are acknowledged for the financial support.

2P09

SYNTHESIS, STRUCTURAL AND MAGNETOCHEMICAL STUDY OF THE IRON(III) SCHIFF BASE COMPOUNDS

Petra Masárová¹, Ivan Šalitroš¹, Milan Gembický², Ján Moncol¹, Ivan Nemeč³

¹Slovak University of Technology, Faculty of Chemical and Food Technology, Institute of Inorganic Chemistry, Radlinského 9, 812 37 Bratislava 1, Slovakia; masarova.petra@gmail.com

²Bruker AXS Inc., 5465 East Cheryl Parkway, Madison, WI 53711-5373, USA

³Palacký University, Regional Centre of Advanced Technologies and Materials, Faculty of Science, Department of Inorganic Chemistry, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, Czech Republic

The twelve iron(III) Schiff base complexes with chlorido or pseudohalido coligands – compounds of the $[\text{Fe}(\text{L})\text{X}]$ type (L is a pentadentate N_3O_2 Schiff base ligand and X is either a chloride or a pseudohalide NCS, NCSe or N_3) have been prepared, structurally and magnetochemically characterized.

The expected coordination chromophores - $\{\text{Fe}(\text{N}_3\text{O}_2)\text{Cl}\}$ or $\{\text{Fe}(\text{N}_3\text{O}_2)\text{N}'\}$ were confirmed by X-ray diffraction analysis. The nitrogen donor atoms are either in *fac* or in *mer* arrangement and the oxygen donor atoms have mostly *cis* configuration. One compound, successfully prepared as a pure *cis* as well as a pure *trans* isomer, is an exception.

The structurally determined compounds were investigated by SQUID. The first complex $[\text{Fe}(\text{L})\text{NCS}]$ revealed the abrupt and complete spin crossover accompanied by 2 K thermal hysteresis [1]. Its crystal structure was solved for

both possible spin states: the low-spin (LS) and the high-spin (HS) in order to see changes of the unit cell parameters (bonds lengths, unit cell volume, etc.). The magnetic behavior of the second compound with NCSe coligand strongly depends on the lattice solvent molecules presence. Once, molecules of the acetone are incorporated into the structure, complex becomes high-spin. Otherwise compound exhibits the gradual and incomplete spin crossover.

We would like to thank Mrs. Kristína Tatár for powder X-ray diffraction analysis of both $[\text{Fe}(\text{L}_2)\text{Cl}]$ isomers. Mrs. Ingrid Svoboda is greatly acknowledged for crystal structures determinations of $[\text{Fe}(\text{L}_1)\text{Cl}]$, $[\text{Fe}(\text{L}_4)\text{Cl}]$ and $[\text{Fe}(\text{L}_7)\text{Cl}]$. We are very grateful to the grant agencies: VEGA 1/0522/14, APVV-14-0078, APVV-0132-11.

[1] Petra Masárová, Pavel Zoufalý, Ján Moncol, et al.: New J. Chem., (2015), 39, 508

2P10

ŠTVORJADROVÉ KOMPLEXY NI(II) S MOTÍVOM KUBÁNOVÉHO A NEÚPLNÉHO DIKUBÁNOVÉHO JADRA

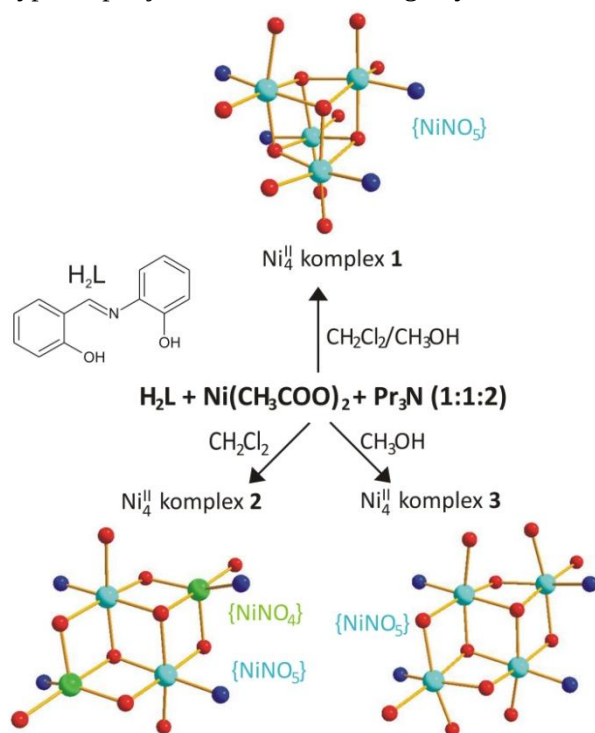
Marek Machata, Ivan Nemeč, Radovan Herchel, Zdeněk Trávníček

¹Katedra anorganické chemie, Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 1192/12, 771 46 Olomouc, marek.machata@upol.cz

Viacjadrové zlúčeniny Ni(II) so štruktúrnym motívom kubánového jadra sa často vyznačujú existenciou dominantnej feromagnetkej výmennej interakcie [1], a preto sú zaujímavými kandidátmi na prípravu jednomolekulových magnetov. Táto práca pojednáva o príprave a vlastnostiach troch nových štvorjadrových Ni(II) komplexov vzorcov $[\text{Ni}_4(\mu_3\text{-L})_4(\text{CH}_3\text{OH})(\text{H}_2\text{O})] \cdot \text{CH}_3\text{OH}$ (**1**, $\text{H}_2\text{L} = 2\text{-}\{(\text{E})\text{-}[(2\text{-hydroxybenzylidén})\text{amino}]\text{fenol}\}$), $[\text{Ni}_4(\mu_3\text{-L})_4(\text{CH}_3\text{OH})_2]$ (**2**) a $(\text{Pr}_3\text{NH})_2[\text{Ni}_4(\mu_3\text{-L})_4(\text{CH}_3\text{COO})_2]$ (**3**, $\text{Pr}_3\text{N} = \text{tripropylamín}$) obsahujúcich motív kubánového Ni_4O_4 (**1**), alebo neúplného dikubánového Ni_4O_6 jadra (**2** a **3**).

Zlúčeniny **1-3** boli pripravené reakciou H_2L s $\text{Ni}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ (v pomere 1:1) v rôznych reakčných médiách: $\text{CH}_3\text{OH}/\text{CH}_2\text{Cl}_2$ (**1**), CH_3OH (**2**) a CH_2Cl_2 (**3**) (**Obr. 1**). Pripravené látky boli charakterizované pomocou elementárnej analýzy, FT-IR spektroskopie, teplotne a poľovo závislých magnetických meraní a monokryštálovej röntgenovej difrakčnej analýzy. V štruktúre

všetkých zlúčenín je pomer deprotonovaného ligandu a centrálného atómu rovnaký (1:1), rozdiel je v usporiadaní koordinačných polyédrov. Zlúčeniny **1** a **3** obsahujú centralne atómy výlučne hexakoordinované, zatiaľ čo v **2** sú atómy Ni(II) hexa- a pentakoordinované. Molekuly rozpúšťadla (CH_3OH) sú v komplexoch viazané kovalentne (**1** a **2**), prípadne aj nekovalentne vo forme kryštalsolvátu (**1**). Analýza magnetických dát bola zameraná na kvantifikáciu výmenných interakcií a magnetickej anisotropie. U zlúčeniny **3**, v ktorej boli všetky výmenné interakcie feromagnetické, bola pozorovaná aj pomalá relaxácia magnetizácie typická pre jedno-molekulové magnety.



Obr. 1 Schématické znázornenie prípravy komplexov **1-3** so znázornením štruktúrnych motívov obsiahnutých v týchto zlúčeninách

Podakovanie za finančnú podporu patrí projektu LO1305 a PrF_2015_19.

- [1] Sophie Hameury, Laure Kayser, Roberto Pattacini, Guillaume Rogez, Wolfgang Wernsdorfer, Pierre Braunstein: Dalton Trans., (2013), 42, 5013-5024

2P11

SOLI A KOMPLEXY GUANIDINIA – STÁLE ATRAKTIVNÍ MATERIÁLY PRO NELINEÁRNÍ OPTIKU

Ivan Němec¹, Zorka Macháčková¹, Irena Matulková¹, Ivana Císařová¹, Petr Němec²

¹Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, katedra anorganické chemie, Hlavova 8, 128 43

Praha 2, Česká Republika agnemec@natur.cuni.cz

²Univerzita Karlova v Praze, Matematicko-fyzikální fakulta, katedra chemické fyziky a optiky, Ke Karlovu 3, 121 16 Praha 2, Česká Republika

Sloučeniny guanidinu jsou již řadu let studovány s ohledem na jejich funkci v živých organismech, využitelnost v molekulovém designu či specifickému fyzikálně-chemickému chování. Kation guanidinia představuje snadno polarizovatelnou, ideálně planární částici s vysokou delokalizací π elektronů. Díky těmto vlastnostem jsou soli a komplexy guanidinia také v centru pozornosti materiálového výzkumu zaměřeného na nelineární optiku (NLO).

Kromě generování druhé harmonické frekvence (SHG) mohou tyto materiály vykazovat celou škálu $\chi^{(2)}$, $\chi^{(3)}$ a kaskádových $\chi^{(2)} \leftrightarrow \chi^{(3)}$ nelineárních optických procesů [1]. Klíčovou rolí ve strukturách těchto sloučenin hrají vodíkové vazby, které kromě stabilizace krystalové struktury pozitivně ovlivňují i jejich nelineární optické vlastnosti.

V tomto příspěvku budou představeny vybrané příklady komplexů a anorganických solí guanidinia. Hlavní pozornost bude zaměřena na jejich krystalografii a spektroskopické vlastnosti, kdy přiřazení prezentovaných vibračních spekter vychází z kvantově-chemických výpočtů. V neposlední řadě bude diskutována jejich fázová stabilita a pozorované NLO vlastnosti.

Autoři děkují Grantové agentuře ČR za podporu v rámci projektu 14-05506S.

- [1] Ladislav Bohatý, Petra Becker, Eiken Haussuhl, Ivan Němec, Oliver Lux, Hans Joachim Eichler, Hitoki Yoneda, Akira Shirakawa, Alexander A. Kaminskii: Z. Kristallogr. (2015) xxx–xxx.

2P12**ÚLOHA VODÍKOVÉ VAZBY PŘI PROTONOVÉ VODIVOSTI KRYSTALICKÝCH LÁTEK; MĚŘENÍ NA PRÁŠKOVÝCH VZORCÍCH**David Havlíček¹, Jiří Plocek², Lukáš Taraba¹¹Katedra anorganické chemie Př.F.UK, Hlavova 2030, 128 43 Praha 2²Ústav anorganické chemie AV ČR v.v.i., Husinec – Řež 1001, 250 68 Řež u Prahy

Studium protonové vodivosti je důležité z mnoha rozdílných pohledů a v mnoha disciplínách. Tato vlastnost může být využita např. v různých senzorech, elektrodách detekujících glukózu nebo cholesterol, v chemických reaktorech pro hydrogenace a dehydrogenace a především v materiálech využívaných pro tzv. „Protony vyměňující membrány“ (PEM) ve vodíkových palivových článcích nebo v palivových článcích na bázi tuhých oxidů (SOFC). Mezi protonové vodiče lze zařadit také soli oxokyselin, které byly studovány na naší katedře po několik let. Protonová vodivost byla pozorována na krystalech hydrogen- a dihydrogenfosforečnanů, hydrogensíranů a hydrogenselenanů, kde kation byl tvořen organickou dusíkatouází. Pozorovaná vodivost těchto látek není příliš vysoká, přesto však přesahuje o několik řádů hodnoty vodivosti izolantů. Na našem pracovišti jsme připravili a studovali tyto látky, stanovili jejich strukturu pomocí rentgenové a neutronové difrakce v kombinaci s molekulovou spektroskopií a změřili protonovou vodivost na orientovaných vzorcích monokrystalů. Tímto způsobem jsme dokázali určit „směr“ přenosu protonů v těchto krystalech.

Příprava velkých monokrystalů, jejich orientace a měření ve vybraných směrech však rozhodně není triviální a časově nenáročnou operací. Proto se v tomto příspěvku zabýváme metodou měření protonové vodivosti na práškových vzorcích, která nám může v prvním přiblížení říci, zdali má smysl zabývat se přípravou a měřením monokrystalů.

2P13**KOORDINAČNÍ VLASTNOSTI FENYL-TRIS(1,2,4-DIAZAFOSFOLYL)BORÁTOVÉHO LIGANDU**Martin Mlateček¹, Jan Honzíček², Libor Dostál¹, Zdeňka Růžicková¹ a Milan Erben¹¹Katedra obecné a anorganické chemie, ²Ústav chemie a technologie makromolekulárních látek, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice 2, Česká republika

Studiu škorpionátových komplexů je v dnešní době věnována zvýšená pozornost, jedná se především o škorpionáty nové generace, které mají široké spektrum využití v materiálovém inženýrství, biochemii, medicíně, katalýze nebo při extrakci kovů. [1,2] Typickými představiteli těchto komplexů jsou tris(pyrazolyl)boráty $M[RB(Pz)_3]_n$ (M = přechodný kov, R = organický substituent, Pz = pyrazol či derivát pyrazolu). K přípravě těchto ligandů se používají různé substituované pyrazoly, avšak již méně často jsou to heterocykly obsahující více heteroatomů jako je například triazol či tetrazol. Použití pětičlenných heterocyklů s těžšími atomy 15. skupiny nebylo doposud popsáno.

V prezentovaném příspěvku bude popsána příprava a koordinační vlastnosti nového ligandu feny-tris(1,2,4-diazafosfolyl)borátu. V sérii studovaných komplexů s přechodnými i nepřechodnými kovy byly pozorovány různé způsoby interakce s centrálním atomem kovu (Schéma 1.):

- κ^3 -N,N,N'' vazba u komplexů (Ti^{4+} , Fe^{2+} , Ni^{2+} , Co^{2+} , Co^{3+} , Mn^{+} , Cd^{2+}),
- κ^2 -N,N' u komplexů (Cu^{+} , Pd^{2+}),
- specifický způsob vazby nového ligandu ($\kappa^2+\eta^3$) ke kovu byl nalezen v thallném komplexu.

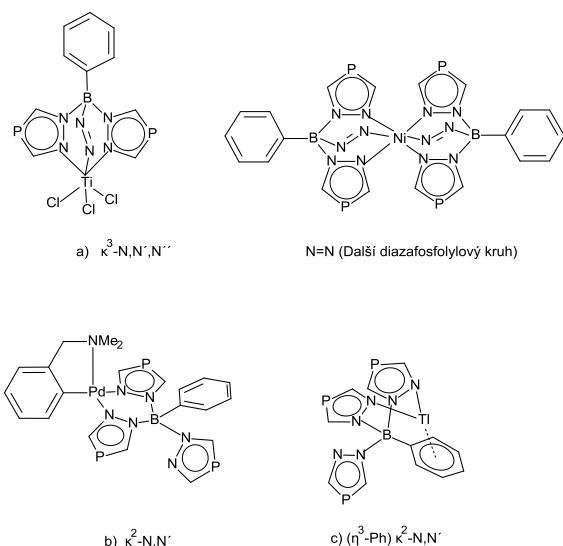


Schéma 1. Příklad koordinací modů fenyl-tris(1,2,4-diazafosfolyl)borátového ligandu

- [1] S. Trofimenko. *Scorpionates: The coordination chemistry of polypyrazolylborate Ligands*. London : Imperial College Press, First published: 1999, Reprinted: 2005. ISBN 1-86094-172-9.
- [2] C. Pettinari, S. Trofimenko. *Scorpionates II: Chelating Borate Ligands*. London : Imperial College Press, 2008. ISBN-13 978-1-86094-876-3.

PREDNÁŠKY - SEKCIA 3: ORGANICKÁ CHÉMIA A POLYMÉRY

3P01

POLYMERY A RADIONUKLIDY – CO TATO KOMBINACE MŮŽE PŘINĚST PRO RADIOFARMACEUTICKÉ APLIKACE?

Martin Hrubý¹, Jan Kučka¹, Ondřej Sedláček¹,
Miroslav Vetrík¹, Aneta Pospíšilová¹, Pavel Švec¹

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

Radiofarmaka mají při použití v polymerních nosičových systémech oproti chemickým léčivům některé výhody. Především pro biologický účinek stačí dopravit nosič do cílové tkáně a není potřeba radiofarmakum z nosiče chemicky odštěpit ani ho nezbytně dostat do buňky. Dále hmotnost účinné dávky medicínsky užívaných terapeutických (β^- a α^- zářiče s vhodným poločasem rozpadu) radionuklidů je o několik řádů menší než u chemických kancerostatik. Významná je i možnost sledovat osud radionuklidu neinvazivními zobrazovacími technikami (theranostika). Tyto možnosti jsme využili pro konstrukci několika systémů. Radioznačené termoresponsivní polymery byly testovány pro lokální radioterapii pevného nádoru na myším modelu jako injikovatelná brachyterapie. Dále byly připraveny a studovány termoresponsivní

micely na bázi poly(*N*-isopropyl akrylamidu) a poly(2-alkyl-2-oxazolinů) jako fyzikálně degradovatelné a glykogen-graft-poly(2-alkyl-2-oxazolin) jako enzymaticky degradovatelné nosiče radiofarmak cílené do pevných nádorů enhanced permeability and retention (EPR) efektem. Pro posílení cílicího efektu do nádorové tkáně bylo studováno zabudování ligandů na bázi analogů neurotransmitterů a hydroxybisfosfonátů. Dalším krokem bylo vytvoření systému pro víceetapové směřování Augerových zářičů až do jaderné DNA, kde hlavním cílem bylo snížit celotělovou zátěž, a systém byl úspěšně otestován na myším nádorovém modelu. Radionuklidy jsme použili i jako stopovač v polymerním systému určeném pro léčbu Wilsonovy choroby.

Autoři děkují za finanční podporu Akademie věd České republiky (grant č. M200501201), Grantové agentuře České republiky (grant č. 13-08336S), Ministerstvu Průmyslu a obchodu České republiky (grant č. FR-TI4/625) a Agentuře zdravotnického výzkumu (grant č. 15-25781A).

3P02**STUDY OF PHOTOCHEMICALLY INDUCED ATOM TRANSFER RADICAL POLYMERIZATION OF (METH)ACRYLATES IN THE PRESENCE OF OXYGEN**

Katarína Borská, Daniela Moravčíková, Anita Eckstein-Andicsová, Jaroslav Mosnáček

Polymer Institute SAS, Dúbravská cesta 9, 845 41, Bratislava, upolmosj@savba.sk

Atom transfer radical polymerization (ATRP) can proceed in the presence of limited amount of oxygen, when it is performed under ARGET conditions. In such system CuBr/ligand complex, after its oxidation by oxygen, can be continuously regenerated *in situ* by reducing agents until all oxygen in the system is consumed; polymerization can then proceed under typical ATRP conditions [1].

In this contribution we will present the study of photochemically induced ATRP (photoATRP) of (meth)acrylates using ppm amounts of copper catalyst in the presence of limited amount of air [2]. In comparison with ARGET ATRP, the presented photoATRP does not need additional chemicals, serving as reducing agents, to reduce copper catalyst oxidized by presence of the oxygen. Without any procedure for degassing of monomer and solvent, well-controlled polymerization starts just after some induction period, which depends on the ligand concentration. Successful chain-extension polymerization confirmed the high degree of livingness of the photoATRP performed in the presence of limited amount of air.

The presented photoRDRP system can have importance from an industrial point of view because costly, time-consuming procedures of removing oxygen from the polymerization mixture can be avoided without losing control over the molecular characteristics of the final polymer.

The authors thank the Slovak Research and Development Agency for the financial support provided through grant APVV-0109-10, Grant Agency VEGA 2/0112/13 as well as the Centre of Excellence of the Slovak Academy of Sciences for Functionalized Multiphase Materials (FUN-MAT).

- [1] K. Matyjaszewski, H. Dong, W. Jakubowski, J. Pietrasik, A. Kusumo, Langmuir, 2007, 23, 4528
- [2] J. Mosnáček, Eckstein-Andicsová, K. Borská, Polym Chem, 2015, 6, 2523

3P03**ANAEROBNÍ DEGRADACE POLYESTERAMIDOVÝCH VLÁKENNÝCH VRSTEV**

Lenka Malinová¹, Jiří Brožek¹, Pavla Káchová², Pavla Šmejkalová²

¹*Ústav polymerů, ²Ústav technologie vody a prostředí, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6 - Dejvice, Česká republika, lenka.malinova@vscht.cz*

Zvláknovací technika melt-blown (foukání taveniny) je hojně využívána pro průmyslovou výrobu netkaných textilií. Vlastnosti vzniklých vláken závisí na konstrukčních parametrech zařízení a také na vlastnostech polymerní taveniny. Průměry vláken získaných technikou melt-blown jsou většinou v rozmezí 2 - 7 µm [1]. Nespornou výhodou metody melt-blown je možnost efektivně zpracovávat polymery z taveniny, tj. bez nutnosti používat rozpouštědla.

Polyesteramidy (PEA) obsahující ε-kaprolaktamové (CLA) a ε-kaprolaktonové (CLO) strukturní jednotky jsou materiály kombinující dobré mechanické vlastnosti alifatických polyamidů s degradabilitou polyesterů [2, 3]. V literatuře nejsou práce zabývající se anaerobní degradací PEA vláknenných vrstev připravených technikou melt-blown.

Anaerobní rozložitelnost vláknenných vrstev o molárním poměru CLA/CLO 80/20 a 60/40 byla studována při teplotě 55 °C v prostředí termofilního kalu z čistírny odpadních vod. Biologická rozložitelnost vláknenných vrstev byla vyhodnocena na základě vznikajícího množství bioplynu při rozkladu. Rozsah degradace vláknenných vrstev v průběhu 2 – 30 týdnů byl posuzován úbytky hmotnosti, změnami redukovaných viskozit, morfologií vzorků, složení kopolymerů a termických vlastností.

Práce byla financována z institucionálních prostředků a z výzkumného záměru MSM6046137308.

- [1] David Petráš, Dušan Kimmer, Karel Soukup, Petr Klusoň: Chem Listy 103, 1009 (2009).
- [2] Daniela Chromcová, Lucie Baslerová, Jan Roda, Jiří Brožek: Eur Polym J 44, 1733 (2008).
- [3] Václav Šásek, Jiří Vitásek, Daniela Chromcová, Irena Prokopová, Jiří Brožek, Josef Náhlík: Folia Microbiol 51, 5 (2006).

3P04**ELECTRODES DECORATED BY METAL NANOPARTICLES FOR SENSING APPLICATION**

Jaroslav Kuliček¹, Matej Mičušík¹, Vitali Scherbahn²,
Vladimir M. Mirsky², Mária Omastová¹

¹ Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences,
Dúbravská cesta 9,
845 41 Bratislava, Slovakia, E-mail:
jaroslav.kulicek@savba.sk

² Nanobiotechnology, Department of Biotechnology,
Brandenburg University of Technology Cottbus -
Senftenberg, Germany

Ionic liquids (IL) have excellent dissolution properties and unchanged conductivity in solutions. Another good feature of ionic liquids are the formation of nanoparticles and their stabilization [1].

Ionic liquid 1-ethyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate with copper nanoparticles were prepared by sputtering of nanoparticles on surface of ionic liquid. The ultra-thin nanocomposite layer containing Cu nanoparticles and conducting polymer polyaniline (PANI) and poly(sodium-4styrenesulfonate) (PSS), has been prepared by Layer-by-Layer (LbL) deposition. The LbL deposition technique presents a simple and low-cost method for the formation of thin composite layers on conducting and non-conducting substrates [2]. Here we performed an LbL-deposition of nanoparticles from ionic liquid. First, PANI was deposited to the surface of gold electrode, then PSS layer, at the next step nanoparticles were deposited from ionic liquid and finally PSS was deposited again. Procedure was repeated several times and electrode was then tested by cyclic voltammetry (CV). CV shows one strong signal in oxidative part of graph, which was assigned to peak coming from Cu. Morphology of the LbL surface was studied with scanning electron microscopy and X-ray photoelectron spectroscopy. The results demonstrate a high potential of LbL deposition of nanoparticles from ionic liquids. The formed copper containing nanocomposite can be used for electrocatalytical oxidation of glucose in non-enzymatic glucose sensors.

Acknowledgement. This work was financially supported by BMFB project POLYCON (Germany), and by APVV-0593-11 and VEGA 2/0149/14 projects (Slovakia).

References

- [1] Welton T., *Coordination Chemistry Reviews*, 248, 2459–2477, (2004).

- [2] Tsakova V., Ivanov S., Lange U., Stoyanova A., Lyutov V. Mirsky M. V., *Pure Appl. Chem.*, 83, No. 2, 345–358, (2011).

3P05**MIKROFIBRILÁRNÍ KOMPOZITY: MOŽNOSTI JEJICH ZLEPŠENÍ APLIKACÍ NANOPLNIV**

Ivan Kelnar, Ludmila Kaprálková

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

Mikrofibrilární kompozity vznikají dlužením polymerních směsí a následným zpracováním při teplotách kdy je zachována fibrilární struktura minoritní dispergované složky. Tato je optimálně tvořena ze semikrystalického polymeru s teplotou tání vyšší než zpracovatelská teplota matrice. Výhodou MFC je zejména výborná dispergace a adheze in situ tvořených vláken, limitující jsou omezené parametry polymerních fibril. Jednou z možností zlepšení parametrů MFC je aplikace nanoplniv (NP). Předností NP je podstatný ztužující efekt při jejich nízkém obsahu, nevýznamné ovlivnění rheologických parametrů a naopak často značný vliv na strukturu polymerních směsí. Výsledky aplikace organofilizovaného montmorillonitu (oMMT) v systému polyethylen (PE)/polyamid 6 (PA6) a oMMT a halloysitu v směsi polykaprolakton (PCL)/polylaktonová kyselina (PLA) ukazují, že působení NP v systému dluženém v tavenině je mimořádně komplexní. V případě PCL/PLA je dlužení možné jen s nanoplniv. Výrazný vliv má migrace NP mezi složkami v průběhu extruze a dlužení, které vede k ovlivnění parametrů mezifází. Analýza metodou konečných prvků ukazuje možnost poklesu tuhosti již při vytvoření ultratenké nízkomodulové vrstvy amorfního PE. Z výsledků je zřejmé, že vlastnosti MFC mohou být významně zlepšeny aplikací NP, podstatné zhoršení vlastností pouhou změnou podmínek přípravy resp. modifikace oMMT ukazují, že jednotlivé dílčí efekty NP musí být perfektně sladěny pro dosažení tohoto cíle.

Práce vznikla s podporou Grantové agentury České republiky (Grant No 13-15255S).

3P06

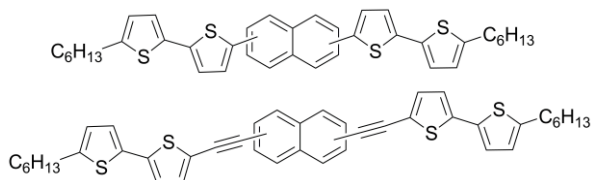
OLIGOTIOFÉNOVÉ DERIVÁTY PRE
APLIKÁCIE V ORGANICKEJ
ELEKTRONIKE

Martin Putala

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

Organické π -konjugované materiály predstavujú alternatívu pre aplikácie v organickej elektronike, keďže umožňujú nanášanie z roztoku. To je obzvlášť dôležité pre výrobu veľkoplošných zariadení. Jedným z najviac študovaných typov takýchto materiálov sú oligotiofénové deriváty, ktoré vďaka atómom síry disponujú vysokou polarizovateľnosťou a dopĺňujúcimi S...S a S... π medzimolekulovými interakciami. Avšak pre dosiahnutie požadovaných vlastností uvedených materiálov je potrebné štúdium vzťahu medzi štruktúrou a ich vlastnosťami.

My sme uskutočnili štúdium série oligotiofénových derivátov, ktoré pozostávajú z naftalénového jadra a hexylbitiofénových ramienok, pripojených priamo [1] alebo cez etynylénový mostík [2]. Preznetovaný bude vplyv polohy naviazania hexylbitiofénových ramienok na naftaléne a vplyv mostíka na molekulové vlastnosti ako aj na funkčné vlastnosti, testované v polovodičových tranzistoroch. Ukazuje sa, že symetria takýchto derivátov výrazne ovplyvňuje ukladanie ich molekúl v kondenzovanej fáze a tým aj polovodičové vlastnosti.



Obr. 1 Štruktúra študovaných oligotiofénových derivátov.

- [1] J. Filo, R. Mišicák, M. Cigán, M. Weis, J. Jakabovič, K. Gmucová, M. Pavúk, E. Dobročka, M. Putala, *Synthetic Metals* 202 (2015), 73–81.
[2] M. Putala a kol., pripravované do tlače.

3P07

VYUŽITÍ INTRAMOLEKULÁRNÍ N-
ARYLACE PRO SYNTÉZU
TRICYKlickÝCH SLOUČENIN
OBSAHUJÍCÍCH 1,4-
DIHYDROCHINOLINOVÝ SKELETBřetislav Brož¹, Petr Šimůnek¹

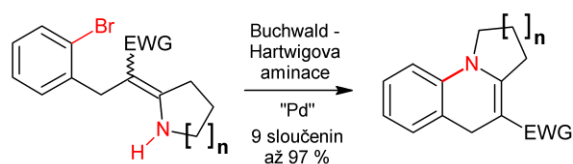
¹Ústav organické chemie a technologie, Fakulta
chemicko-technologická, Univerzita Pardubice,
Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika,
Bretislav.Broz@upce.cz

Tato práce je zaměřena na přípravu několika *ortho*-kondenzovaných 1,4-dihydrochinolinů s využitím intramolekulární Buchwald – Hartwigovy aminace jakožto klíčového kroku celé syntézy (viz **Obr. 1**).

Meziprodukty pro cyklizaci, exocyklické „push-pull“ polarizované enaminy nesoucí jednu ze tří vybraných elektron-akceptorních skupin a 2-brombenzylový fragment, byly připraveny v souladu s mírně modifikovanými metodami [1, 2] z příslušných pětičlenných ($n = 1$) až sedmičlenných ($n = 3$) laktamů, které jsou komerčně snadno dostupné. Postup zahrnuje čtyřstupňovou syntézu v celkových středních výtěžcích.

Závěrečná palladiem katalyzovaná *N*-arylace byla vyvinuta z dřívějších méně úspěšných metod [3]. Byly nalezeny dva nejvhodnější katalytické systémy, jejichž použitím bylo dosaženo vynikajících výsledků cyklizační reakce: až 97 % izolovaného výtěžku při použití 1,5 mol % katalyzátoru.

Diskutovány budou detailní podmínky jednotlivých syntetických kroků, a také použité katalytické systémy a jejich efektivita.



Obr. 1 Schéma klíčové intramolekulární *N*-arylace, $n = 1-3$, EWG = COOMe, COMe, CN.

Tato práce byla vytvořena za finanční podpory Ústavu organické chemie a technologie Univerzity Pardubice.

- [1] J. P. Célérier, E. Deloisy, G. Lhommet, P. Maitte; *J. Org. Chem.*, **1979**, 44, 3089 – 3089.
[2] M. Misun, A. Pfaltz; *Helv. Chim. Acta*, **1996**, 79, 961 – 972.
[3] Y. Liu, C.-Y. Yu, M.-X. Wang; *ARKIVOC*, **2003**, 2, 146 – 152.

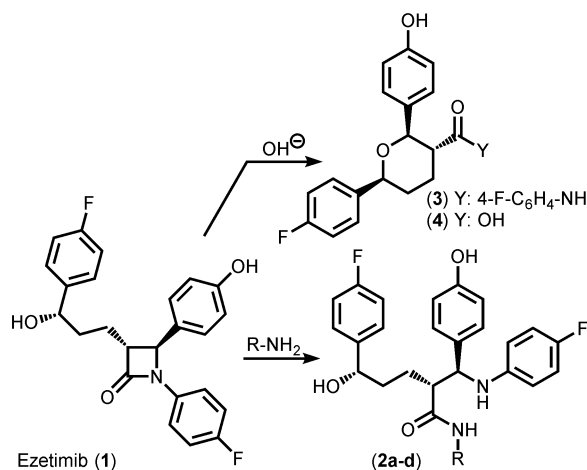
3P08

TRANSFORMACE EZETIMIBU
V BAZICKÉM PROSTŘEDÍJiří Hanusek¹, Jana Baťová¹

¹Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Jiri.Hanusek@upce.cz

Ezetimib (**1**) je vysoce účinný a selektivní inhibitor cholesterolové absorpce. Blokuje vstřebávání dietního a žlučového cholesterolu v tenkém střevě, aniž by ovlivnil absorpci mastných kyselin, žlučových kyselin, triacylglycerolů, progesteronu, ethinylestradiolu nebo vitaminů rozpustných v tucích [1].

V našich pracích jsme se zaměřili na studium transformace Ezetimibu (**1**) ve slabě bazickém prostředí (pH < 12.5) aminových pufrů, poskytující buď produkt přesmyku (**3**) [2] nebo produkt aminolýzy (**2a-d**) [3]. Nejprve byla studována závislost rychlosti transformace Ezetimibu (**1**) v terciárních aminových pufrách s pH 7-12.5. Zde selektivně probíhala pouze transformace na tetrahydropyran-3-karboxamid (**3**) a teprve při pH > 12.5 (tj. v roztocích hydroxidu sodného) se začala otevírat nová reakční cesta zahrnující hydrolytické štěpení β-laktamového kruhu, po němž následovala cyklizace na tetrahydropyran-3-karboxylovou kyselinu (**4**). Je zajímavé, že samotná hydrolyza amidické skupiny derivátu **3** na karboxylovou kyselinu **4** neprobíhá. V roztocích primárních aminových pufrů byl pozorován paralelně probíhající přesmyk a aminolýza β-laktamového kruhu, poskytující amidy (**2a-d**). Dále bylo zjištěno, že pro aminolýzu Ezetimibu je klíčová přítomnost fenolické hydroxyskupiny. V případě, že je tato skupina blokována etherifikací – aminolýza prakticky vůbec neprobíhá.



R: a) n-C₄H₉; b) CH₃OCH₂CH₂; c) HOCH₂CH₂; d) CH₃OCH₂CH₂CH₂

Obr. 1 Přesmyk a aminolýza Ezetimibu (**1**)

Práce byla podpořena z institucionální podpory poskytnuté MŠMT ČR.

- [1] Sobolová L.: *Klin. Farmakol. Farm.* **2005**, 19, 22-26.
- [2] Baťová J., Imramovský A., Hájíček J., Hejtmánková L., Hanusek J.: *J. Pharm. Sci.* **2014**, 103, 2240-2247.
- [3] Baťová J., Imramovský A., Hanusek J.: *J. Pharm. Biomed. Anal.* **2015**, 107, 495-500.

3P09

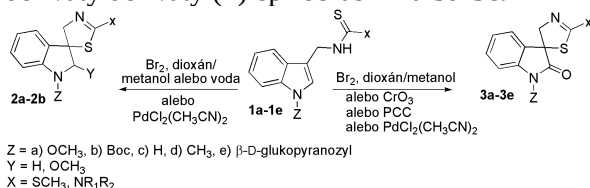
SPIROCYKLIZAČNÉ REAKCIE
INDOLOVÉHO FYTOALEXÍNU
BRASINÍNU A JEHO DERIVÁTOVMariana Budovská¹

¹Univerzita P.J. Šafárika, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Katedra organickej chémie, Moyzesova 11, 040 01 Košice, Slovensko, mariana.budovska@upjs.sk

Spiroindolínové fytoalexíny, syntetizované a akumulované v rastlinách čeľade *Kapustovité* (*Brassicaceae*) ako reakcia na biotický alebo abiotický stres, predstavujú štruktúrne neobvyklú skupinu prírodných látok s antimikrobiálnou, protirakovinovou a antitrypanozómnou aktivitou [1, 2].

Na prípravu racemátov spirozlúčenín **2a** a **2b** bola vyvinutá brómom iniciovaná spirocyklizácia 1-metoxy- a 1-Boc-brasinínu (**1a**, **1b**, X = SCH₃) s vodou alebo metanolom ako nukleofilom [3]. Brómcyklizáciou brasinínu (**1c**, X = SCH₃) a jeho 1-metylderivátu **1d** v prítomnosti vody vznikajú rozkladné produkty, avšak v zmesi dioxán-metanol dochádza k premene na racemát spirobrasinínu (**3c**, X = SCH₃) a 1-metylspirobrasinínu (**3d**, X = SCH₃).

Spiroindolinové zlúčeniny **2a** a **2b** možno pripraviť aj cyklizáciou 1-metoxi- a 1-Boc-brasinínu a ich derivátov **1a**, **1b** použitím paládiového katalyzátora $\text{PdCl}_2(\text{CH}_3\text{CN})_2$ v DMSO pri 80°C v prítomnosti vody alebo metanolu. Spirocyclizáciou brasinínu (**1c**, $\text{X} = \text{SCH}_3$) a jeho 1-metylderivátu **1d** účinkom $\text{PdCl}_2(\text{CH}_3\text{CN})_2$ sa získa spirobrasinín (**3c**, $\text{X} = \text{SCH}_3$) a 1-metylspirobrasinín (**3d**, $\text{X} = \text{SCH}_3$). Oxidačná spirocyclizácia brasinínov a ich derivátov **1a-1e** s CrO_3 alebo PCC poskytuje deriváty deriváty ($\pm$)-spirobrasinínu **3a-3e**.



Obr. 1

Táto práca vznikla za podpory VEGA grantu 1/0954/12 a VVGS-PF-2012-31.

- [1] M. S. C. Pedras, E. E. Yaya, E. Glawischnig: Nat. Prod. Rep. 28, 1381 (2011).
- [2] R. Mezencev, M. Galizzi, P. Kutschy, R. Docampo: Experimental Parasitol. 122, 66 (2009).
- [3] P. Kutschy, M. Suchý, K. Monde, N. Harada, R. Marušková, Z. Čurillová, M. Dzurilla, M. Miklošová, R. Mezencev, J. Mojžiš: Tetrahedron Lett. 43, 9489 (2002).

3P10

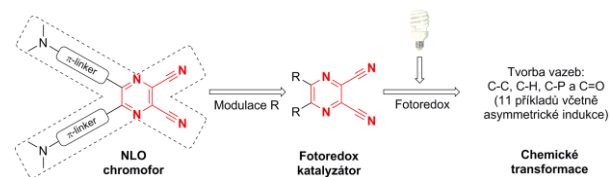
PUSH-PULL DERIVÁTY PYRAZINU JAKO EFEKTIVNÍ FOTOREDOX KATALYZÁTORY

Filip Bureš¹

¹Ústav organickej chemie a technológie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika, filip.bures@upce.cz, <http://bures.upce.cz>

V súčasnej dobe jsou funkcionalizované π -konjugované molekuly stredem zájmu organických i materiálových chemiků a náležajú perspektívnej aplikácie v zariadeniach jako jsou NLO, DSSC, OLED, OPVC, OFET apod. Vlastnosti π -konjugovaných zlúčenín v D- π -A usporiadání (barva, polari(zabili)ta, solvatochromie a rovněž biologická aktivita) jsou převážně dominovány interakcí mezi donorem a akceptorem, tzv. vnitřním přenosem náboje. V roce 2012 byl v naší skupině připraveny push-pull zlúčeniny ve tvaru písmene X na bázi pyrazin-2,3-dikarbonitrilu a tyto dále zkoumány jako efektivní chromofory s nelineárně optickými vlastnostmi [1, 2]. Vedle nelinearit druhého druhu byly u některých

derivátů pozorovány i fotoredox vlastnosti. Z tohoto důvodu byla dále provedena modulace optoelektronických vlastností vybraných derivátů s cílem získat čistě organický fotoredox katalyzátor. Vlastnosti byly modulovány především změnou elektron donoru a π -konjugované cesty k pyrazin akceptoru (R). Byl nalezen vhodný derivát, který prokázal fotoredox aktivitu v široké paletě organických transformací zahrnujících tvorbu C-C, C-H, C-P i C=O vazeb (Obr. 1). Katalytická aktivita byla demonstrována ve více než 11 typech reakcí, kdy množství katalyzátoru povětšinou nepřekračuje 0,1 % a v některých případech dokonce 0,01 %, což představuje doposud nejnižší množství katalyzátoru použitého ve fotoredox katalýze [3]. Navíc, vyvinutý fotoredox katalyzátor na bázi push-pull pyrazinu se ukázal jako vysoce aktivní v bezpříkladné asymetrické oxidativní olefinaci tetrahydroisochinolinů. Jejich reakce s akryldehydem poskytovala za 0,05% katalýzy a přítomnosti β -isocupreidinu vysoké chemické výtěžky a excelentní enantioselektivitu v rozsahu 81-91 %.



Obr. 1 Od NLO chromoforů k fotoredox katalyzátorům

Tato práce byla podpořena Technologickou agenturou České republiky (TE01020022, Flexprint).

- [1] F. Bureš, H. Čermáková, J. Kulhánek, M. Ludwig, W. Kuznik, I. V. Kityk, T. Mikysek, A. Růžička: Eur. J. Org. Chem. **2012**, 529.
- [2] L. Dokládlová, F. Bureš, W. Kuznik, I. V. Kityk, A. Wojciechowski, T. Mikysek, N. Almonasy, M. Ramaiyan, Z. Padělková, J. Kulhánek, M. Ludwig: Org. Biomol. Chem. **2014**, 12, 5517.
- [3] Y. Zhao, C. Zhang, K. F. Chin, O. Pytela, G. Wei, H. Liu, F. Bureš, Z. Jiang: RSC Advances **2014**, 4, 30062.

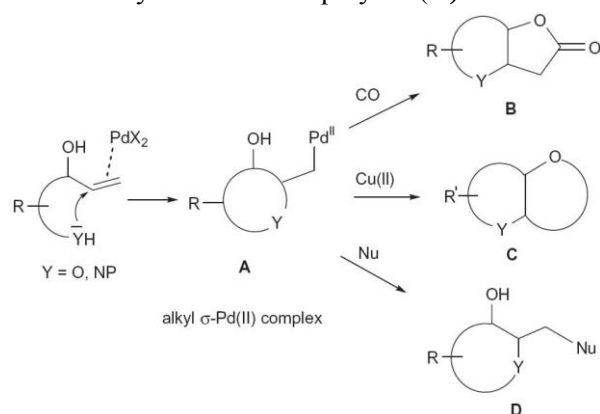
3P11

STEREOSELEKTIVITA PD-CYKLIZÁCIÍ V DOMINO REAKCIÁCH

Angelika Lásiková¹, Jana Doháňošová², Tibor Gracza¹

¹Oddelenie organickej chémie, ²Oddelenie NMR spektroskopie a hmotnostnej spektrometrie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, angelika.lasikova@stuba.sk

Paládium(II)-katalyzované reakcie nenasytených polyolov, medzi ktoré patria aj oxykarbonylácie a bicyklizácie [1], sú významnými metódami stereoselektívnej prípravy nasýtených heterocyklov, prítomných v mnohých biologicky zaujímavých látkach. Kľúčovým intermediátom týchto transformácií je alkyl- σ -Pd(II) komplex **A** (Obr. 1), ktorý je vychytávaný oxidom uhoľnatým (**B**) resp. ďalšou hydroxylovou funkčnou skupinou špecificky umiestnenou v reťazci východiskového polyolu (**C**).



Obr. 1 Pd(II)-katalyzované cyklizácie v domino reakciách.

Ďalšou z možností je vychytávanie alkyl- σ -Pd(II) komplexu v procese predĺženia uhlíkového reťazca vinyláciou [2a] alebo intramolekulovým nukleofilným atakom s následným kaplingom s arylhalogenidmi [2b].

Prvé dve transformácie sú riadené energiou produktu a prebiehajú s vysokou stereoselektivitou. Stereoselektivita poslednej z uvedených cyklizácií závisí od substituentov na východiskovom reťazci alkenolu a je ovplyvniteľná vhodnou voľbou substituenta a jeho polohy. S cieľom sledovať vplyv O-substituenta v alylovej polohe východiskového alkénu na stereoselektivitu reakcií bola uskutočnená štúdia, zaoberajúca sa prípravou látok typu **D** (Obr. 1). Na základe získaných výsledkov sme sa pokúsili o návrh možných mechanizmov, ktorými uvedená transformácia

prebieha a o predpovedanie stereoselektívneho priebehu reakcie.

Autori by radi poďakovali za finančnú podporu grantovým agentúram: Vedeckej grantovej agentúre MŠVVaŠ SR a SAV (1/0488/14), Agentúre na podporu výskumu a vývoja (APVV-14-0147) a Agentúre ministerstva školstva, vedy, výskumu a športu SR pre štrukturálne fondy EÚ (ITMS: 26240120001, 26240120025).

- [1] Gracza, T. Intramolecular Oxycarbonylation in Stereoselective Synthesis in Stereoselective Synthesis of Drugs & Natural Products, Edited by Vasyľ Andrushko and Natalia Andrushko, Wiley, Inc. 2013, Chapter 15, pp 421-440.
- [2] a) Semmelhack, M. F.; Epa, W. R. *Tetrahedron Lett.* **1993**, 34, 7205–7208., b) Wolfe, J. P. *Eur. J. Org. Chem.* **2007**, 571-782.
- [3] Lásiková, A.; Doháňošová, J.; Hlavínová, L.; Toffano, M.; Vo-Thanh, G.; Kožíšek, J.; Gracza, T. *Tetrahedron: Asymmetry* **2012**, 23, 818-827.

3P12

KATALÝZA MĚDNÝMI KOMPLEXY V POST-ULLMANOVĚ DOBĚ

Pavel Pazdera¹, Nitin Kore¹, Dana Herová¹

¹Centrum pro syntézy za udržitelných podmínek a jejich management, Ústav chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Kotlářská 2, 611 37 Brno, pazdera@chemi.muni.cz

Když Fritz Ullmann publikoval v roce 1901 výsledky syntéz diarylů z brom-/iodbenzenů katalyzované elementární mědí [1], podložené experimentálními poznatky jeho manželky Arny Goldberg, netušil, jak tento jeho objev (Ullmannova reakce) ovlivní organickou syntetickou chemii.

Když se od počátku 50-tých let minulého století [2] začaly syntetizovat a charakterizovat sloučeniny Cu(III), dostaly se Ullmanovy poznatky a výsledky jeho pokračovatelů do zcela nové roviny. Skutečnost, že měď je schopna vytvářet stabilní oxidační stavy Cu(I)/Cu(III), poskytla široké možnosti využití v homogenní organické katalýze. Při katalýze pak mohou probíhat takové elementární děje, jako je oxidační adice – heterolytická adice – redukční eliminace (Ullmanovy couplingy). Jednou z mála nevýhod existence stavů Cu(III) je nutnost jejich stabilizace donorními ligandy.

Naše pracoviště zjistilo, že uvedený problém lze řešit imobilizací Cu(I)/Cu(III) na levných průmyslových slabě kyselých katexech polyakrylátového typu [3], přičemž ve většině případů není potřeba přidávat další stabilizující

ligandy. Imobilizovaný katalyzátor je na vzduchu stabilní. Velkou výhodou je skutečnost, že (imobilizovaný) systém Cu(I)/Cu(III) umožňuje nahradit drahé homogenní katalyzátory Pd(0)/Pd(II) apod. při srovnatelných katalytických možnostech.

V příspěvku budou uvedeny příklady organických syntéz katalyzovaných různými typy sloučenin Cu(I), jako jsou například nejrozličnější C-N, C-C couplingy včetně Buchwaldova–Hartwigova a Sonogashirova–Hagiharova, dále syntézy z kontextu „Click Chemistry“, některé oxidační procesy apod.

Výsledky byly získány díky finanční podpoře České republiky, Národní politika výzkumu II, Trvalá prosperita, projekt č. 2A-1TP1/090, poskytovatel dotace Ministerstvo průmyslu a obchodu ČR, a Technologické agentury ČR, projekt č. TA02010144.

- [1] F. Ullmann, J. Bielecki (1901). "Ueber Synthesen in der Biphenylreihe". *Chemische Berichte* **34** (2) 2174–2185.
- [2] R. Scholder, U. Voelskow. „Über Cuprate (III)“. *Z. Anorg. Allg. Chem.* 1951, 266, 256; I. P. Beletskaya, A. V. Cheprakov. „Copper in cross-coupling reactions; The post-Ullmann chemistry“. *Coordination Chemistry Reviews* 248 (2004) 2337–2364.
- [3] P. Pazdera, B. Zberovská, D. Němečková, V. Datinská, J. Šimbera. „Katalyzátor pro chemické syntézy na bázi komplexu kovu a způsob jeho přípravy“ (Masarykova univerzita). CZ20110799 (A3) (2013).

3P13

STEREOSELEKTIVNÁ SYNTÉZA 1-DEOXYSFINGOIDNÝCH BÁZ

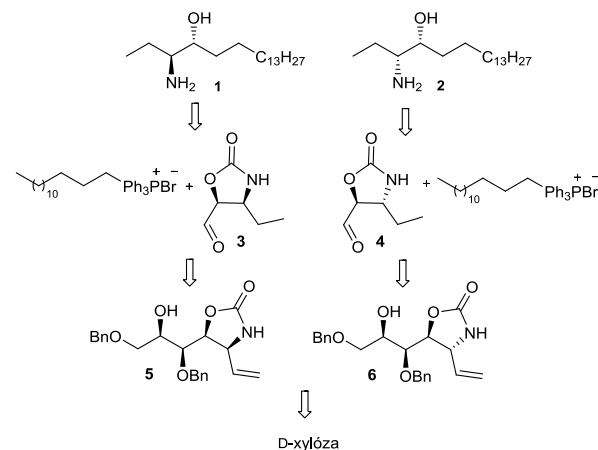
Kvetoslava Pomikalová¹, Miroslava Martinková¹, Zuzana Švajleninová¹, Jozef Gonda¹

¹Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, PF, Katedra organickej chémie, Moyzesova 11, 040 01 Košice, kvetoslava.pomikalova@upjs.sk

Štruktúrnym prvkom bunkových membrán cicavcov, ratlín, húb, morských organizmov a niektorých prokaryotov sú sfingolipidy, stavebné komponenty zabezpečujúce mnohé fyziologické procesy buniek. Centrálnu časť každého sfingolipidu tvorí tzv. sfingoidná báza [1]. Z prírodných zdrojov bolo izolované veľké množstvo rôznych typov sfingoidných báz, od najbežnejších s 2-amino-1,3-diolovým zoskupením, po mnoho ďalších, líšiacich sa počtom a polohou hydroxylových skupín, polohou násobnej väzby a počtom atómov uhlíka. Medzi veľmi zaujímavú skupinu sfingoidných

štruktúr patria 1-deoxysfingoidné bázy, z ktorých mnohé vykazujú antikarcinogénne účinky. [2]

Náš syntetický prístup využíva chirálny východiskový substrát, D-xylózu, transformovaný na sériu reakčných krokov na deriváty **5** a **6**, významné prekursory cieľových 1-deoxysfingoidných báz **1** a **2**.



Obr. 1 Syntetický plán prípravy 1-deoxysfingoidných báz.

Tento príspevok vznikol s podporou projektov VVGS-2014-172, VVGS-PF-2014-440, VEGA 1/0168/15, VEGA 1/0398/14.

- [1] Kolter, T.; Sandhoff, K. *Angew. Chem. Int. Ed.* **1999**, 38, 1532–1568 a práce tam citované.
- [2] Pruett, S. H.; Bushnev, A.; Hagedorn, K.; Adiga, M.; Haynes, C. A.; Sullards, M. C.; Liotta, D. C. Merrill, A. H., Jr. *J. Lipid Res.* **2008**, 49, 1621–1639.

3P14

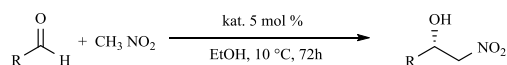
IMOBILIZOVANÉ MĚDNATÉ KOMPLEXY – RECYKLOVATELNÉ ENANTIOSELEKTIVNÍ KATALYZÁTORY PRO HENRYHO REAKCI

Miloš Sedlák, Jiří Hanusek, Pavel Drabina

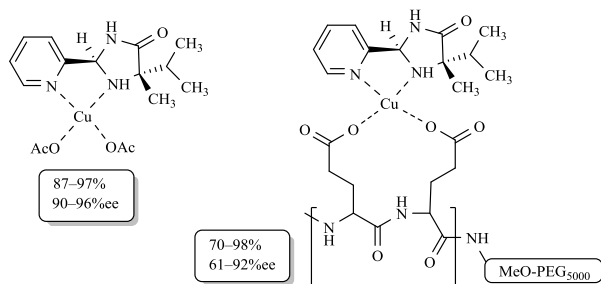
Ústav organickej chémie a technológie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Milos.Sedlak@upce.cz

Henryho reakcie katalyzovaná chirálnymi opticky čistými komplexmi prechodných kovů predstavuje jednu ze základných stereoselektívnych reakci vedúcu ke vzniku väzby uhlík–uhlík. Konkrétnymi produktmi této reakcie jsou pak opticky čisté substituované 2-nitroalkoholy [1-3]. Předmětem tohoto sdělení jsou katalyzátory Henryho reakcie odvozené od mědnatých komplexů zakotvených na rozdílných nosičích. Byl připraven a charakterizován katalyzátor založený na botnavém perlovém kopolymeru

styren/4-vinylbenzylchlorid síťovaný tetra(ethylenglykol)-bis(4-vinylbenzyl)etherem (2%) (200-800 μm) na kterém byl kovalentně zakotven (1*R*,2*R*)-2-(2,3-dihydro-1*H*-isoindol-2-yl)-1,2-difenylethan-1,2-diamin a následně komplexován s octanem měďnatým. Druhý katalytický systém je založen na koloidním komplexu měďnaté soli blokového kopolymeru methoxypoly(ethylenglykol)-*b*-poly(L-glutamové kyseliny) s (2*R*,5*S*)-5-isopropyl-5-methyl-2-(pyridin-2-yl)imidazolidin-4-onem [2] (Obr 1).



R: Ph, 2-MeOPh, 4-ClPh, 4-BrPh, 4-PhPh, *t*-Bu



Obr. 1 Henryho reakce katalyzovaná homogenním a koloidním katalyzátorem

Analogicky byl připraven třetí typ recyklovatelného katalyzátoru založený na magneticky separovatelných nanočásticích $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{SiO}_2$. Připravené katalyzátory byly testovány pro reakce substituovaných aldehydů s nitromethanem v ethanolu. Byly porovnány původní homogenní katalyzátory s jejich imobilizovanými verzemi. Hlavními kritérii při posouzení vlivu imobilizace na účinnost katalyzátoru bylo ovlivnění celkového výtěžku reakce, enantioselektivity, možnost recyklace a vliv recyklace na tyto parametry. Díky vysoké stabilitě komplexů v reakčním prostředí bylo možné katalyzátory jednoduše separovat a recyklovat s minimálními poklesy enantioselektivity a chemického výtěžku. Výše diskutovatelné katalyzátory splňují řadu požadavků zelené a udržitelné chemie a představují tak ekologicky vstřícné systémy s vysokým aplikačním potenciálem pro provedení Henryho reakce.

Autoři děkují za finanční podporu projektu GAČR 14-00925S.

[1] Ananthi, N.; Velmathi, S. *Ind. J. Chem.* **2013**, 52B, 87–108.

[2] Panov, I.; Drabina, P.; Padělková, Z.; Šimůnek, P.; Sedlák, M. *J. Org. Chem.* **2011**, 76, 4787–4793.

[3] Drabina, P.; Harmand, L.; Sedlák, M. *Curr. Org. Synth.* **2014**, 11, 879–888.

3P15

VYUŽITÍ POLYMERNÍCH DONORŮ OXIDU DUSNATÉHO PRO ZVÝŠENÍ AKUMULACE CYTOSTATIK A IMUNOMODULÁTORŮ V MIKROPROSTŘEDÍ PEVNÝCH NÁDORŮ

Martin Studenovský,¹ Milada Šírová,²

¹Ústav makromolekulární chemie AV ČR, Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6, Česká Republika

²Mikrobiologický ústav AV ČR, Videňská 1083, 142 20 Praha 4, Česká Republika

E-mail: studenovsky@imc.cas.cz

Současná chemoterapie nádorových onemocnění má mnoho závažných vedlejších účinků, limitujících její efektivitu. Navázáním klasických cytostatik (antracykliny, taxany) na polymerní nosič je možno významně zvýšit jejich terapeutickou účinnost a snížit toxicitu. EPR (Enhanced Permeability and Retention) efekt vede k selektivní akumulaci vysokomolekulárních látek (≥ 40 kDa) v pevných nádorech, a to díky pro polymery prostupnému endotelu nádor vyživujících cév a téměř chybějící lymfatické drenáži. Polymerní konjugáty s cytostatikem mají tedy vyšší protinádorovou aktivitu než původní léčivo *in vivo*. Cílem této práce je studium vasodilatačního účinku oxidu dusnatého (NO), vedoucího k zesílení stávajícího EPR efektu u pevných nádorů, ve formě polymerních NO donorů a porovnání jejich aktivity s nízkomolekulárními NO donory (nitroglycerin). Očekávaným přínosem polymerního konjugátu, nesoucího NO donor, je jak selektivita k nádorové tkáni, tak potlačení toxicity spolu s prodloužením doby cirkulace v krevním řečišti. Byla syntetizována série polymerních NO donorů na bázi HPMA kopolymeru a byla prokázána jejich schopnost uvolňování volného NO ve dvou nádorových liniích *in vitro*. Vybrané polymerní konjugáty jsou v současné době studovány *in vivo* na myších modelech nesoucích nádor, kdy je pomocí fluorescenčních sond kvantifikován jejich vliv na intenzitu EPR efektu. Hlavním výstupem pak bude posouzení jejich terapeutické aktivity v kombinaci s kancerostatikem (doxorubicin, pirarubicin, docetaxel).

Tato práce je realizována díky finanční podpoře Grantové agentury České republiky (grant 14-12742S).

3P16**GRAFÉN – POLYMÉRNE
NANOKOMPOZITY NA POVRCHOVÚ
ÚPRAVU TEXTÍLIÍ**

Zdeno Špitalský

*Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 845 41
Bratislava, zdeno.spitalsky@savba.sk*

Predmetom nášho výskumu je laboratórne overenie prípravy elektrovodivého nanosólu pre povrchovú úpravu textilných materiálov. Na prípravu elektrovodivého nanosólu sa využili polymérne kompozity s grafénom, ktorý je známy svojimi unikátnymi vlastnosťami ako napríklad vysoká elektrická a tepelná vodivosť, flexibilita a výborné mechanické vlastnosti (pevnosť 130 GPa a Youngov modul 1 TPa) [1]. Ako zdroj grafénu sa využil komerčne dostupný expandovaný grafit, ktorý je nekarcinogénny a patrí k cenovo najvýhodnejším zdrojom nanoplínv na báze uhlíka. U textílií sa merala ich vodivosť, termogravimetrická analýza a uhly zmáčania. Pre všetky upravené textílie sa porovnala stabilita povrchovej úpravy vypieraním.

V sledovaných meraniach sa nám podarilo pripraviť elektricky vodivé textílie s vodivosťou rádovo až 10^{-4} S/cm, pričom povrchová úprava bola stabilná aj po opakovanom vypratí. Najlepší výsledok sa získal pre polyesterovú textíliu s povrchovou úpravou s kopolymérom akrylátu.

Autor by sa rád poďakoval za podporu projektu ŠF Výskum technológií a výrobkov pre INteligentnéa TECHnické TEXtilie (ITMS kód 26220220134) v spolupráci s VÚTCH-CHEMITEX Žilina a projektu APVV Výskum vplyvu nízkoteplotnej PLAZmy na zvýšenie povrchovej permanentnosti úpravy TEXtilných materiálov s použitím NANOsól (APVV-14-0518).

[1] Špitalský, Z. et al. Curr. Org. Chem. **2011**, Vol. 15, 8, pp. 1133-1150

3P17**TULIPS AS A SOURCE OF MONOMER
FOR SUPERABSORBENT HYDROGELS**

Daniela Moravčíková,¹ Jozef Kollár,¹ Miroslav Mrlík,²
Zuzana Kroneková,¹ Igor Lacík,¹ Jaroslav Mosnáček¹

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

² Centre of Polymer Systems, University Institute,
Tomáš Baťa University in Zlín, Nad Ovčírnu 3685,
760 01 Zlín, Czech Republic,
(Daniela.Moravcikova@savba.sk,
www.polymer.sav.sk)

New class of superabsorbent hydrogels was synthesized by copolymerization of acrylamide with sodium 2-(2-hydroxyethyl)acrylate (SHEA), derived by hydrolysis of α -methylene- γ -butyrolactone (MBL) - a renewable monomer which can be isolated from tulips. For our studies MBL was synthesized by short procedure of Murray. [1] The aim of the present work was to develop a synthetic method in order to synergistically combine the swelling properties of SHEA with practical advantages of acrylamide. Radical polymerization of SHEA was studied for the first time, while the extent of side products through the ring closure depended on the pH used during the polymerization. The effect of chemical composition (acrylamide (AM) : SHEA), the concentration of monomers in water, amounts of crosslinker and initiator were investigated. This study provides a correlation between the composition and the corresponding hydrogel properties. Hydrogels with various composition were also investigated for their swelling and mechanical properties as well as cytotoxicity. Hydrogels showed equilibrium degree of swelling in the range of 2000 – 70000 % in distilled water. The water absorption capacity and mechanical properties of the hydrogels can be tuned by SHEA content. The copolymers and hydrogels of AM and SHEA represent biocompatible materials as shown in vitro by cytotoxicity assay.

Authors thank for financial support to project SAS-MOST JRP 2014-9 "Synthesis of well-defined novel copolymers by use of living polymerization methods and advanced chromatography technique", Grant agency VEGA 2/0167/14 and the Centre of Excellence SAS for Functionalized Multiphase Materials (FUN-MAT).

[1] Murray, A.W., Reid, R.G.: J. Chem. Soc., Chem. Commun. 132-133, (1984)

3P18**SYNTEZA POLYMERNÍCH KONJUGÁTŮ
LIGANDŮ MUSKARINOVÉHO
RECEPTORU PRO ONKOLOGICKOU
DIAGNOSTIKU A TERAPII**

Aneta Pospíšilová¹, Ondřej Sedláček¹, Martin Hrubý¹,
Markéta Jiráťová²

¹Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i.,
Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6, pospisilova-
@seznam.cz

²Institut klinické a experimentální medicíny, 1958/9,
140 21 Praha 4

Muskarinový acetylcholinový receptor (MACHR) je dlouho zkoumán hlavně pro svou funkci v nervovém systému. Ukazuje se ovšem, že některé typy rakovinných buněk jej silně hyperexprimují. Ligandy MACHR je proto možné použít pro vysoce účinné cílení rakovinné tkáně, pokud se zabráni jejich průniku k nervovým buňkám. Ideálním řešením je navázáním ligandu na vhodnou polymerní nanočástici, která znemožní průnik ligandu k nervové tkáni a navíc může nést a řízeně uvolňovat chemoterapeutikum. Náš tým se v současnosti zabývá přípravou kopolymerů na bázi poly(N-(2-hydroxypropyl)methakrylamidu) nesoucích různé ligandy muskarinového receptoru - estery tropinu nebo chinuklidiny benzilát a testováním jejich vlastností *in vitro*.

Autoři děkují za finanční podporu Akademii věd České republiky (grant č. M200501201), Grantové agentuře České republiky (grant č. 13-08336S), Ministerstvu Průmyslu a obchodu České republiky (grant č. FR-TI4/625) a Agentuře zdravotnického výzkumu (grant č. 15-25781A).

3P19**PRÍPRAVA HYPERVETVENÝCH
POLY(ESTERAMIDOV)
A POLY(ÉTERAMIDOV) AKO
MAKROINICIÁTOROV PRE KATIÓNOVÚ
POLYMERIZÁCIU 2-OXAZOLÍNŮV**

Petra Šrámková¹, Juraj Kronek¹

Ústav Polymérov, Slovenská Akadémia Vied,
Oddelenie pre Výskum Biomateriálov, Dúbravská
cesta 9, 84541 Bratislava, Slovakia,
petra.sramkova@savba.sk

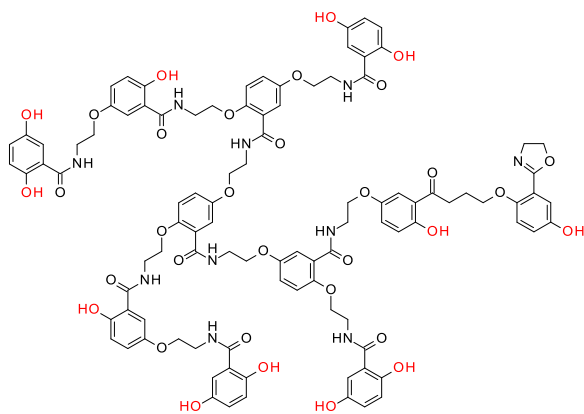
Poly(2-oxazolín) sa vďaka vlastnostiam výhodným pre biomedicínske aplikácie stali jedným z preferovaných materiálov v tejto oblasti. Biokompatibilita, rozpustnosť vo vode, termosenzitivita, či jednoduchá príprava sú prednosťami poly(2-oxazolín) v porovnaní s doteraz najviac využívaným biokompatibilným

materiálom poly(etylénglykolom). Katiónová polymerizácia s otvorením kruhu (CROP) svojím živým charakterom predstavuje výborný prostriedok na prípravu požadovaných a dobre definovateľných štruktúr. Všestrannosť a variabilitu CROP 2-oxazolínov dokazuje široká knižnica architektur, od lineárnych cez hviezdicové, kefkovité, či nanoštruktúrne materiály.

Hviezdicové polyméry s ramenami na báze 2-oxazolínov boli v rámci metódy „core-first“ pripravené z nízkomolekulových multifunkčných iniciátorov, ale aj z makroiniciátorov dendritickej štruktúry, či z makrocyclických iniciátorov (porfyrín, cyklodextrín, kalixarén). Polymérne hviezdy s amfifilným charakterom by mohli slúžiť ako nosiče liečiv¹.

Doteraz existuje len niekoľko publikácií, ktoré využívali na CROP 2-oxazolínov hypervetvené makroiniciátory. Weberskirch použil hypervetvené jadro na báze kyseliny 4,4-bis(4-hydroxyfenyl)pentánovej modifikované 3-(chloromethyl)benzoyl chloridom, ktorý slúžil ako iniciátor pre CROP 2-metyl-2-oxazolínu². Ďalším bol hypervetvený makroiniciátor so štruktúrou polyglycidolu s niekoľkými toluénsulfónovými funkčnými skupinami, ktoré iniciovali CROP 2-etyl-2-oxazolínu³.

Naším cieľom bolo pripraviť hypervetvené makroiniciátory s poly(éteramidovou) štruktúrou, ktorých hlavnou stavebnou jednotkou boli tri štruktúrne izoméry 2-(dihydroxyfenyl)-2-oxazolínu a makroiniciátory s poly(esteramidovou) štruktúrou z komerčne dostupného hypervetveného polyméru Hybrane H1500. Koncové hydroxylové skupiny hypervetvených polymérov boli modifikované rôznymi iniciačnými skupinami. Štruktúra, reaktivita a ostatné charakteristiky pripravených makroiniciátorov boli definované dostupnými metódami (NMR, FTIR, GPC, DSC, XPS, MALDI). Pripravené makroiniciátory sú vhodné pre prípravu hviezdicových polymérov.



Obr. 1: Idealizovaná štruktúra hypervetveného polyméru z 2-(2,5-dihydroxyfenyl)-2-oxazolínu

Autori ďakujú Grantovej agentúre SAV a MŠ za finančný príspevok v projekte VEGA 2/0163/15. Prezentované výsledky tiež boli získané riešením projektu grantovej schémy M-Era.Net s akronymom M2Neural.

- [1] Knop, K.; Pretzel, D.; Urbanek, A.; Rudolph, T.; Scharf, D. H.; Schallon, A.; Wagner, M.; Schubert, S.; Kiehnopf, M.; Brakhage, A. A.; Schacher, F. H.; Schubert, U. S. *Biomacromolecules* **2013**, *14*, 2536–2548.
- [2] Weberskirch, R.; Hettich, R.; Nuyken, O.; Schmaljohann, D.; Voit, B. *Macromol. Chem. Phys.* **1999**, *200*, 863–873.
- [3] Kowalczyk, A.; Kronek, J.; Bosowska, K.; Trzebicka, B.; Dworak, A. *Polym. Int.* **2011**, *60*, 1001–1009.

3P20

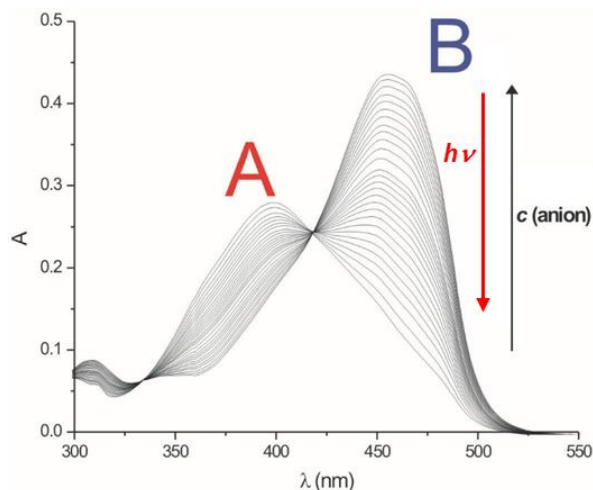
MONOSTABLE PHOTOSWITCHES BASED ON HYDRAZONE-ANION INTERACTION

Miroslav Horváth¹, Marek Cigáň¹, Martin Gáplovský¹, Klaudia Jakusová¹, Jana Donovalová¹, Anton Gáplovský¹

¹Chemický ústav PriF UK v Bratislave, Il'kovičova 6, 842 15 Bratislava, horvathm@fns.uniba.sk

Isatin-hydrazones represent a new class of Vis-Vis molecular photoswitches [1, 2]. The strongly basic anion addition to basic isatin phenylhydrazone more stable Z-isomer solutions leads to the hydrazone NH deprotonation with the significant hydrazone-azo tautomeric equilibrium shift to the anionic azo A-form side [2]. Interestingly, although azo A-form is photostable at the daylight, its irradiation with stronger 465 nm LED light source leads to the main absorption band intensity decrease with the concurrent repeated absorbance increase at approximately 400 nm. The overall process related to mutual transformation of A and B forms is reversible and

switching cycles can be repeated many times in both directions. This unusual behaviour of isatin phenylhydrazones in the presence of anions gives them a potential for various practical applications, although the quantum yield of photochemical A→B transformation is relatively low ($\Phi \sim 0.001$).



This contribution is the result of the projects implementation (ITMS 26240220086 and ITMS 26240220071) supported by the OPRaD funded by the ERDF.

- [1] Marek Cigáň, Martin Gáplovský, Klaudia Jakusová, Jana Donovalová, Miroslav Horváth, Juraj Filo, Anton Gáplovský: RSC Advances, (2015)
- [2] Marek Cigáň, Klaudia Jakusová, Jana Donovalová, Martin Gáplovský, Juraj Filo, Miroslav Horváth, Anton Gáplovský: Chemistry – A European Journal, (2015), submitted manuscript

3P21

PRÍPRAVA POTENCIÁLNYCH INHIBÍTOROV GLYKOZYLTRANSFERÁZ – SYNTÉZA MIMETÍK TS

Marek Baráth¹, Miroslav Kooš¹, Chun Hung Lin², Igor Tvaroška^{1,3}, Ján Hirsch¹

¹Chemický ústav SAV, Dúbravská cesta 9, 84538 Bratislava, Slovensko marek.barath@savba.sk

²Academia Sinica, 11529 Taipei, Taiwan

³Fakulta prírodných vied UKF, 94974 Nitra, Slovensko

Glykozyltransferázy (GT) predstavujú skupinu enzýmov, ktoré katalyzujú vznik novej glykozidovej väzby. Patria medzi skupinu enzýmov, ktoré pre svoju funkciu vyžadujú dva substráty, donor a akceptor. GT sa touto svojou funkciou podieľajú na biosyntéze disacharidov až polysacharidov a na biosyntéze bunkových stien. Glykozylácia proteínov cez biosyntézu O- a N-viazaných oligosacharidov je zase nevyhnutná pre

správny „folding“ a funkciu proteínov[1]. Funkčné GT sú teda nevyhnutnou súčasťou buniek a akékoľvek mutácie v génoch kódujúcich jednotlivé GT a zmena v prirodzenej rovnováhe medzi glykozyltransferázami a glykozidázami môžu viesť k vážnym zdravotným komplikáciám, akými sú nielen nádorové ochorenia, ale aj diabetes či Alzheimerova choroba [2]. Dôležitosť glykozylácie a jej správne fungovanie sa preto stali predmetom záujmu mnohých vedeckých či farmaceutických výskumných skupín s cieľom vyvinúť liečebný postup založený na ovplyvňovaní zmien v glykozylácii. Špecifická inhibícia GT poskytuje nielen dôležité informácie o spôsobe účinku týchto enzýmov, ale predstavuje aj strategický cieľ pri liečení viacerých chorôb spôsobených poruchami glykozylácie. Glykozylačná reakcia prebieha cez tranzitný stav (TS), ktorý zahŕňa štyri komponenty zúčastňujúce sa samotnej premeny; akceptorový substrát, donorový substrát, enzým a kovový kofaktor (ak ho enzým vyžaduje). Mimetiká TS sú definované ako stabilné zlúčeniny, ktoré svojou štruktúrou napodobňujú 3D priestorové usporiadanie a nábojové rozloženie nestabilného TS enzymatickej reakcie [3].

Príspevok opisuje prípravu mimetik TS glykozyltransferáz. Pripravené boli deriváty D-fruktofuranózy, D-psikofuranózy a D-tagatofuranózy, pričom prístupujúci glykozyl akceptor bol mimikovaný rôzne substituovanými tioglykozidmi v polohe C-2 a odstupujúca UDP skupina bola mimikovaná fosfátovou skupinou. Tieto základné skelety sú nadalej študované za účelom zvýšenia ich stability pri fyziologických podmienkach.

Práca vznikla za podpory grantov VEGA 1/0962/12, SAS-NCS JRP 2012/8, VEGA, VEGA 2/0064/15. Táto práca bola podporovaná tiež Agentúrou na podporu

výskumu a vývoja na základe Zmluvy č. APVV-0602-12“.

- [1] R. V. Stick, et al. Carbohydrates: The Essential Molecules Of Life, New York: Elsevier, 2009.
- [2] C. X. Gong, et al. *Journal of Neural Transmssion*, zv. 112, pp. 813-838, 2005.
- [3] L. Sihelníková, et al. *Collection of Czechoslovak Chemical Communications*, zv. 73, pp. 591-607, 2008.

3P22

OD ŠAMANOV K NARKOMANOM. ŠTRUKTÚRA, SYNTÉZA, VLASTNOSTI A ÚČINKY PRÍRODNÝCH A SYNTETICKÝCH DROG.

Na pamiatku mojej Fafinke.

Miroslav Kríž

Tau-Chem s.r.o., 83405 Bratislava, Nobelova 34.

kriz@tau-chem.sk

Sú od nepamäti tu, ako súčasť nášho života. Už pre vyše 5000 rokmi naši predchodcovia Homo sapiens používali mnohé prírodné drogy ako súčasť svojich rituálov. Z dochovaných nástenných kresieb a sošiek experimentovali z halucinogénnymi hubami a lianami a všetkým čo im príroda ponúkala. Postupom času a zdokonalením vedomostí o účinkoch mnohých prírodných drog sme sa „úspešne“ prepracovali až k tomu, že sa drogy varia v kuchyni a milióny ľudí sa stalo závislým na tejto novodobej pliaže. Táto prednáška sa v krátkosti pokúsi priblížiť svet drog a ich negatívne dôsledky pre ich konzumentov, ktorých možno nazvať aj Homo narkomanicus.

PREDNÁŠKY - SEKCIA 4: VYUČOVANIE A HISTÓRIA CHÉMIE

4P01

VÝUKA CHEMIE – SOUČASNOST A PERSPEKTIVA

Hana Čtrnáctová

Univerzita Karlova v Praze – Přírodovědecká fakulta,
Albertov 6, 128 43 Praha 2, ctr@natur.cuni.cz

Chemické vzdělávání se realizuje na více úrovních, ale dominantní postavení má výuka chemie na základních školách a středních školách, která zasahuje prakticky celou populaci. Chemie byla mezi vyučovací předměty zařazena již v 19. století. Zpočátku byla spojována s jinými přírodovědnými předměty, ale postupně se zcela osamostatnila. Dnes patří mezi předměty, které jsou vyučovány na všech ZŠ a na většině SŠ. Svědčí o tom i její hodinová dotace v učebních plánech ZŠ a SŠ, která se však v posledních 40 letech téměř nezměnila [1].

Na rozdíl od neměnné hodinové dotace je zřejmé, že obsah a metody výuky chemie na úrovni ZŠ a SŠ by se měly měnit a odrážet úroveň chemických oborů a jejich aplikací i požadavky společnosti na výuku tohoto předmětu. V souvislosti s nárůstem chemických poznatků ve 20. století byl obsah učiva chemie rozšiřován dalšími teoretickými poznatky a fakty a čas porozumět jim se tím více zkracoval. To vedlo k tomu, že výuka chemie na ZŠ a SŠ se stále více vzdalovala poznatkům a zkušenostem běžného života a ztrácela experimentální charakter [2]. Jedním z perspektivních přístupů pro inovaci obsahu a metod výuky chemie se nyní jeví badatelsky orientovaná výuka považovaná za jeden z přístupů, který může výuku chemie výrazně zlepšit [3].

Tento příspěvek byl vytvořen za podpory projektu Univerzity Karlovy v Praze: PRVOUK P42 Chemie.

- [1] Čtrnáctová H., Zajíček J.: Chem. Listy. 104, 811-818 (2010).
- [2] Held, L.: SCIED, 2, 2011, 69-79 (2011).
- [3] European Commission: *Science Education Now: A renewed Pedagogy for the Future of Europe* [online]. [cit. 2014-06-10] Dostupné z: ec.europa.eu/research/sciencsociety/document_library/pdf_06/report-rocard-on-science-education_en.pdf (2007).

4P02

EFEKTIVNOST BĀDATEĽSKY ORIENTOANEJ VYUČBY

Mária Ganajová¹, Ivana Sotáková¹

¹Oddelenie didaktiky chémie, Ústav chemických vied,
Prírodovedecká fakulta UPJŠ, Moyzesova 11, 040 01
Košice, maria.ganajova@upjs.sk,
ivana.sotakova@upjs.sk

Príspevok informuje o výsledkoch výskumu zameraného na overovanie efektívnosti bádateľsky orientovanej výučby (BOV) v chémii. Výskum sme realizovali u žiakov základných a stredných škôl po BOV tém Kyseliny a zásady, Zmesi a Vlastnosti plastov na celkovej vzorke 197 žiakov. Overovanie bolo zamerané na rozvoj porozumenia a spôsobilostí vedeckej práce. Úroveň porozumenia sme overovali na základe testov a nástrojmi sebahodnotenia. Rozvoj spôsobilostí vedeckej práce sme sledovali na základe hodnotiacich tabuliek.

Na overovanie porozumenia sme použili testy overujúce poznatky na úrovni vyšších myšlienkových operácií. Pedagogický výskum po BOV témy Skúmanie roztokov kyselín, zásad a solí poukázal na vyššiu úspešnosť experimentálnej skupiny (BOV) v porovnaní so žiakmi kontrolnej skupiny (tradičná výučba) a to bezprostredne po BOV, ale aj s časovým odstupom.

Ako príklad hodnotenia vedeckých spôsobilostí uvádzame rozvoj argumentácie pri BOV témy Elektrická vodivosť plastov. Pri stanovení rozvoja tejto spôsobilosti sme stanovili nasledovné kritéria: *Úroveň 1* Žiak háda, argumenty zakladá na domnienkach. *Úroveň 2* Žiak argumentuje na základe skúseností, pozorovaní a poznatkov z bežného života, vedecky to však nezdôvodňuje. *Úroveň 3* Žiak rozumie podstate vodivosti látok, vedecky to zdôvodňuje.

Z overovania aj ďalších spôsobilostí, čo potvrdzujú aj poznatky zo zahraničných výskumov [1, 2] vyplýva, že BOV rozvíja porozumenie, prírodovednú gramotnosť, ako aj všetky vedecké spôsobilosti.

- [1] Harlen, W. 2013. Assessment & Inquiry-Based Science Education: *Issues in Policy and Practice*. [online]. [cit. 2015-04-14]. Global Network of Science Academies (IAP) Science Education Programme (SEP) Trieste, Italy. Dostupné na: <http://www.interacademies.net/File.aspx?id=21245>
- [3] Orna, M. V. 2010. *SourceBook and 21st Century Chemistry Education. A SourceBook Module*. [online]. [cit. 2015-05-11]. Dostupné na:

<<http://dwb4.unl.edu/ChemSource/SourceBook/15221SE.pdf>>

4P03

PŘÍNOS UPA A IRER K PODPOŘE VZDĚLÁVÁNÍ A POZNÁVÁNÍ ŽÁKŮ I VEŘEJNOSTI V OBLASTI CHEMIE

Patrik Pařík¹

¹Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika, Patrik.Parik@upce.cz

V dnešní přetechizované době paradoxně klesá rozsah a kvalita výuky technických disciplín na nižších školských stupních a s tím se dramaticky zhoršuje i zájem o ně. Snižuje se povědomí o experimentálních disciplínách nejen mezi žáky, ale celkově u veřejnosti. Vědecké a vyšší vzdělávací instituce proto vynakládají značné úsilí k podpoře a popularizaci technických věd včetně chemie.

Univerzita Pardubice i její dceřiná společnost IRER, Institut rozvoje evropských regionů, o. p. s., podnikají masivní snahy o zlepšení této neutěšené situace. V rámci několika projektů řešených v posledních letech (Trojlístek, BRAVO [1], BRAVO II aj.) i v rámci přirozených snah Univerzity Pardubice a IRER byly a jsou uskutečňovány rozmanité akce, na kterých pracovníci i studenti univerzity prezentují výsledky vlastního výzkumu a vývoje i krásy chemie v jejích nejjednodušších podobách. Akce se uskutečňují nejenom na půdě univerzity, ale mnohdy i pod širým nebem nebo pod střechou některé hostitelské instituce jako jsou Pardubický zámek či základní a střední školy nejenom v Pardubickém kraji. Pro mnoho akcí, ať už jen ukázkových nebo přímo interaktivních a zážitkových, byly vypracovány pracovní postupy a vytvořeny logistické procedury k přepravě nezbytného materiálu, pomůcek a chemikálií.

V příspěvku budou prezentovány realizované akce, zvolené experimenty a vytvořené materiály. Budou zhodnoceny principiální odlišnosti jednotlivých akcí, ze kterých pak pramení volba vhodných experimentů, způsob jejich prezentování nebo realizování a rozdílné personální i materiální zabezpečení.

[1] Patrik Pařík, Dagmar Holucová, Petr Bělina: ChemZi 9/1, 219-220 (2013).

4P04

ZA CHEMIÍ DO PŘÍRODOVĚDNÉ LABORATOŘE PEVNOSTI POZNÁNÍ

Jana Prášilová¹, Pavlína Ginterová¹

¹Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta, Pevnost poznání, 17. listopadu 7, 779 00 Olomouc, j.prasilova@upol.cz

V polovině dubna se široké veřejnosti otevřely brány Pevnosti poznání – návštěvnického centra Univerzity Palackého v Olomouci [1]. S krátkým předstihem se do interaktivního muzea vědy měli možnost podívat žáci především z fakultních základních škol. Od 16. dubna jsou pak všem školám nabízeny školní vzdělávací programy nejen z oblasti chemie, ale i dalších hlavních vyučovacích předmětů.

Především na základních školách nemají mnohdy učitelé chemie k dispozici specializované učebny. V přírodovědné laboratoři Pevnosti poznání najdou nejen potřebné vybavení, ale hlavně nadšené lektory (budoucí učitelé chemie), které vedou vysokoškolské pedagogy. Školám jsou nabízena cvičení pro druhý stupeň ZŠ a SŠ, která jsou v souladu se školními vzdělávacími programy (např. Vlastnosti kovů, Soli, Analýza vody) i popularizační témata (Po stopách růžového pantera).

Přírodovědná laboratoř slouží i budoucím nadějným chemikům - v květnu letošního roku hostila krajské kolo chemické olympiády kategorie B a soutěž L@byrint chemie.

[1] <http://www.pevnostpoznani.cz/>

4P05

10 ROKOV SPOTREBITEĽSKEJ CHÉMIE V PRÍPRAVE UČITEĽOV CHÉMIE

Ján Reguli

Katedra chémie, Pedagogická fakulta Trnavskej univerzity, Priemyselná 4, 918443 Trnava, jan.reguli@truni.sk

Od roku 2002 sa predžila príprava slovenských učiteľov pre základné školy na päť rokov, následne došlo k rozčleneniu vysokoškolského učiteľského štúdia na bakalársky a magisterský stupeň a súčasne sa zjednotila príprava učiteľov pre ZŠ a SŠ. Na PdF TU sa do prípravy učiteľov chémie zaradili Komunikácia vedy, Integrované vyučovanie prírodovedných predmetov, Angličtina pre učiteľov chémie a Spotrebiteľská chémia¹.

Spotrebiteľská chémia sa na zahraničných univerzitách využíva ako „chémia pre nechemikov“ – predmet, ktorý si musia zapisovať napr. študenti nechemických študijných programov amerických College.

Cieľom našej Spotrebiteľskej chémie je príprava chemicky gramotných učiteľov², ktorí vedú svojim žiakom odpovedať na otázky, týkajúce sa chemickej podstaty fungovania vecí okolo nás. Takéto vedomosti výrazne prispievajú k autorite učiteľa v očiach jeho žiakov. Spotrebiteľská chémia obsahuje nasledovné kapitoly: Chémia a bezpečnosť práce. Čistiace prostriedky. Kozmetika. Liečivá. Hnojivá a pesticídy. Prídavné látky v potravinách. Polyméry a plasty. Energia a palivá. Katalyzátory. Nové materiály a nové technológie³.

Súčasťou predmetu sú úlohy pre študentov. Ide napr. o oboznámenie sa s označovaním výrobkov – chemikálií, liečiv, ale aj potravín a plastov. Hlavnou úlohou je príprava prezentácie približujúcej spolužiakom nový materiál alebo novú technológiu. Takýmto spôsobom sa študenti zoznámili s novými materiálmi v medicíne (biokompatibilné plasty), použitím kmeňových buniek, vysokoteplotnými supravodičmi, gigantickou magnetorezistenciou a novými pamäťovými médiami, materiálmi s tvarovou pamäťou, vodivými plastmi a pod.

Príspevok vznikol v rámci riešenia a vďaka podpore grantu KEGA 004TTU-4/2013 Tvorba vzdelávacích materiálov pre pregraduálne a celoživotné vzdelávanie učiteľov chémie a riešiteľov úloh chemickej olympiády.

- [1] Reguli, J.: Nové predmety v príprave učiteľov chémie na PdF TU. *Význam chemie pro život společnosti – výukové aplikace.* (Aktuální otázky výuky chemie XVII.) str. 134-138. Hradec Králové : Gaudeamus 2008. ISBN 978-80-7041-214-5.
- [2] Reguli J.: Rozvíjanie kľúčových kompetencií učiteľov chémie. *Pregraduální příprava a postgraduální vzdělávání učitelů chemie.* Sborník přednášek z mezinárodní konference 20.-22.5.2003 v Rožnově pod Radhoštěm, str. 125-129. ISBN 80-7042-960-7.
- [3] Reguli J.: Příprava učitelův ako informovaných spotrebiteľov. *Aktuálne trendy vo vyučovaní prírodovedných predmetov.* Bratislava : PriF UK 2007, str. 247-250. ISBN 978-80-88707-90-5.

4P06

HISTÓRIA POTRAVINÁRSKEHO PRIEMYSLU NA SLOVENSKU

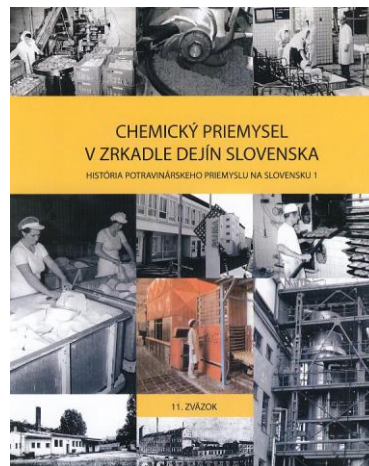
Michal Uher¹, Ľudovít Hallon², Kamil Cejpek³, Viktor Milata¹

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 narástla.



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.

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

Na 166 stranách okrem informácií z oblasti technológie a techniky sú zachytené aj unikátne strojné zariadenia a osobnosti z vývoja a riadenia podnikov. Každá kapitola je doplnená mnohými dobovými fotografiami, ktoré sa ešte podarilo zachrániť.

Práca bola podporená grantom MŠ SR agentúry VEGA č. 2/0144/13 a 2/0164/13.

Literatúra:

Chemický priemysel v zrkadle dejín Slovenska: História potravinárskeho priemyslu na Slovensku. 1. diel, 11. zväzok, Nakladateľstvo STU, Bratislava 2013, 166 s.

4P07

HISTÓRIA SPRACOVANIA KOŽÍ A GARBIARSKY PRIEMYSEL NA SLOVENSKU

Branislav Krasnovský¹, Michal Uher², Miroslav Sabol³, Viktor Milata²

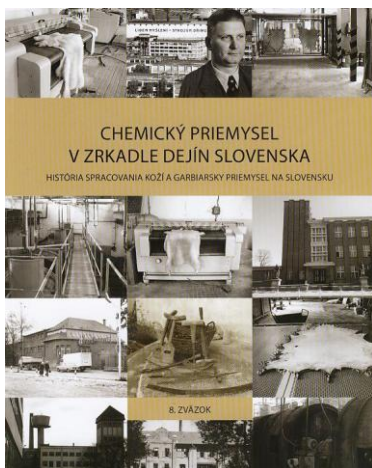
¹Pedagogická fakulta Univerzity Komenského, Račianska ul. 59, 831 02 Bratislava

²Oddelenie organickej chémie, Ústav organickej chémie, katalýzy a petrochémie FCHPT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava (viktor.milata@stuba.sk)

³Historický ústav SAV, Klemensova ul. 19, 814 99 Bratislava

Spracovanie kože patrí k najstarším ľudským pracovným činnostiam. Počiatky spracovania kože spadajú hlboko do obdobia praveku a najstarších dejín a úzko súvisia so vznikom odevnej kultúry. Garbiarstvo patrí k najstarším remeslám v ľudských dejinách.

V prednáške postupne predstavíme garbiarsky priemysel do roku 1800, v rokoch 1800 – 1918, v rokoch 1918 – 1939, 1939 – 1948 a po roku 1948.



Predstavíme závody na spracovanie koží v Bošanoch, Liptovskom Mikuláši a v Nových Zámkoch.

V 8. zväzku série monografií „Chemický priemysel v zrkadle dejín Slovenska“ je venovaná časť výchovy inžiniersko-technických

pracovníkov, učňovskému dorastu a osobnostiam garbiarskeho priemyslu na Slovensku.

Práca bola podporená grantom MŠ SR agentúry VEGA č. 2/0144/13 a 2/0164/13.

Literatúra:

Chemický priemysel v zrkadle dejín Slovenska: História spracovania koží a garbiarsky priemysel na Slovensku. 8. zväzok, Nakladateľstvo STU, Bratislava 2014, 100 s.

4P08

VÝZNAMNÁ VÝROČÍ POUŽITÍ CHEMICKÝCH ZBRANÍ

Zdeněk Šafařík¹, Dušan Vičar¹, Ivan Mašek¹, Ivan Princ¹

¹RNDr. Zdeněk Šafařík, PhD., Tomas Bata University in Zlín, nám. T. G. Masaryka 5555, 760 01 Zlín, Czech Republic. E-mail: safarik@flkr.utb.cz

¹Prof. Ing. Dušan Vičar, CSc., Tomas Bata University in Zlín, nám. T. G. Masaryka 5555, 760 01 Zlín, Czech Republic. E-mail: vicar@flkr.utb.cz

¹Doc. Ing. Ivan Mašek, CSc., Tomas Bata University in Zlín, nám. T. G. Masaryka 5555, 760 01 Zlín, Czech Republic. E-mail: masek@flkr.utb.cz

¹Ing. Ivan Princ, Tomas Bata University in Zlín, nám. T. G. Masaryka 5555, 760 01 Zlín, Czech Republic. E-mail: iprinc@flkr.utb.cz

Problematika zbraní hromadného ničení neustále poutá pozornost nejen politiků a vojenských odborníků, ale i světové veřejnosti. V roce 2015 si připomínáme 100 let od prvního použití chemických zbraní, ale současně také 70 let od prvního použití jaderných zbraní. 22. duben 1915, kdy Němci poprvé použili chlór jako bojovou chemickou látku proti Francouzům, je spojován s počátkem chemické války, který znamenal předěl v dějinách válek.

Dalším mezníkem v historii vedení válek se stal 6. srpen 1945, kdy došlo ke svržení první atomové bomby na Hirošimu, což znamenalo kapitulaci Japonska, a tím i konec II. světové války (Nagasaki).

I když se technický rozvoj všech skupin zbraní hromadného ničení v průmyslově vyspělých státech koncem 80. let minulého století zpomalil, tak v současnosti existují i méně rozvinuté státy, které o přístup k jednotlivým druhům zbraní hromadného ničení nejen usilují, ale jsou samostatně schopny docílit v této oblasti takové technické úrovně, která zajišťuje jejich výrobu, a tím i možné zneužití. V průběhu studené války (1949 – 1990) byly jaderné, chemické,

bakteriologické a toxínové zbraně ve vysoké pohotovosti k bojovému použití.

Chemické zbraně a bojové chemické látky jsou v České republice zakázány zákonem č. 19/1997 Sb. a prováděcí vyhláškou č. 208/2008 Sb. ve znění pozdějších úprav.

- [1] Otakar Jiří Mika, Ivan Mašek, Dušan Vičar: Historie a současnost chemických zbraní. Praha: Časopis 112, číslo 4/2015, s. 16 – 19. ISSN 1213-7057, (2015)
- [2] Ivan Princ, Jan Strohmandl, Dušan Vičar: Historické milníky použití ZHN a terorismus. Uherské Hradiště: Historie a současnost chemických zbraní. 27. – 28. květen 2015. Vědecko-odborná konference. ISBN 978-80-7454-491-0, (2015)
- [3] Ivan Mašek, Dušan Vičar, Zdeněk Šafařík: IVA – Vysoce toxická organofosforová sloučenina poslední generace. Uherské Hradiště: Historie a současnost chemických zbraní. 27. – 28. květen 2015. Vědecko-odborná konference. ISBN 978-80-7454-491-0, (2015)

The proposed long term sustainable strategy for nuclear- and radiochemistry education in Europe will be presented. Its main aim is to create conditions for coordination of the current fragmented and diverse activities in both the education and training field at both the Ph.D. and undergraduate levels. In the education field, the aim is to introduce the EuroMaster in Nuclear and- Radiochemistry quality label guaranteed by EuCheMS. In the training field formation of a long-term Euratom Fission Training Scheme (EFTS) is the ultimate goal. These measures are currently under development in a follow-on Euratom FP7 project “Cooperation In education and training in Nuclear CHemistry (CINCH-II)”.

4P09

COOPERATION IN EDUCATION AND TRAINING IN NUCLEAR- AND RADIOCHEMISTRY IN EUROPE

J. John

Department of Nuclear Chemistry, Czech Technical University in Prague, 115 19 Prague, Czech Republic, jan.john@jfifi.cvut.cz

The motivation, history and status of coordination of education and training in nuclear- and radiochemistry in Europe will be reviewed and correlated to similar activities in other nuclear fields. The achievements of the Euratom FP7 project “Cooperation In education in Nuclear CHemistry (CINCH)” will be described in detail. This description will cover both the status review and the development activities of this Collaboration. In the status review field, the results of a detailed survey of the universities and curricula in nuclear- and radiochemistry in Europe and Russia will be presented. In the development activities field, the main achievements of the CINCH project will be presented. They are particularly the NucWik – an open platform for collaboration and sharing teaching materials in nuclear- and radiochemistry based on a wiki engine and the CINCH Moodle e-learning platform.

PREDNÁŠKY - SEKCIA 5

POTRAVINÁRSTVO, ŽIVOTNÉ PROSTREDIE A BIOTECHNOLÓGIA

5P01

ŠPECIÁLNE PRODUKTY Z FYTOMASY

Stanislav Sekretár¹, Lenka Tmáková¹, Štefan Schmidt¹, František Kreps¹, Zuzana Burčová¹

¹Ústav biotechnológie a potravinárstva, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, stanislav.sekretar@stuba.sk

Fytomasa je zdroj širokej palety fytochemikálií [1]. V súčasnosti sa z tejto lacnej a obnoviteľnej suroviny vyrába množstvo špeciálnych produktov určených pre rozmanité aplikačné využitie. V prvom stupni sa použije vhodná metóda izolácie žiadaných zložiek z rastlinného materiálu (extrakcia, lisovanie, destilácia s vodnou parou a pod.) tak, aby vo výslednom produkte bolo čo najmenej balastných látok. V druhom stupni sa získaný produkt (podľa potreby) zvyčajne ďalej frakcionuje a separujú sa jeho účinné zložky. V treťom stupni sa výsledný produkt štandardizuje a charakterizuje. V práci sa podrobnejšie popisuje príprava produktov v rôznych aplikačných formách:

- využitie prírodných extraktov na prípravu formulácií s antioxidačnými a povrchovo aktívnymi vlastnosťami (určené na stabilizáciu tukov, pre čistiace prípravky),
- využitie extraktov z kôry Borovice prímorskej pri príprave antioxidačne účinných farmaceutických prípravkov (Pycnogenol),
- izolácia resp. príprava definovaných lipidov (mastné kyseliny a ich estery, fosfolipidy) z tukov a olejov (analytické štandardy resp. suroviny pre syntézu),
- príprava štrukturovaných tukov chemickou resp. enzymatickou modifikáciou prírodného tuku (tuky pre kojeneckú výživu, tuky pre gerontologické prípravky, náhradky kakaového masla),
- príprava agrochemikálií na báze fytochemikálií (feromóny hmyzu, stimulátor rastu rastlín).

Vstupnou surovinou môžu byť aj vedľajšie produkty z potravinárskych výrob (šupky, šroty olejní), prípadne odpady (kôra stromov, piliny). Zlepšuje sa tak ekonomika a ekológia výroby.

Práca bola podporená Vedeckou grantovou agentúrou MŠVVaŠ SR a SAV v rámci zmluvy č. VEGA-1/0860/13 a Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APVV-0850-11 a na základe zmluvy č. APVV-0393-14.

[1] Bernd Schaefer: *Natural Products in the Chemical Industry*. Springer-Verlag, Berlin 2014, 844 p. ISBN 978-3-642-54460-6.

5P02

BIOACTIVE CARBOHYDRATES FROM FUNGI *ALTERNARIA BRASSICICOLA* AND *LEPTOSPHERIA MACULANS*, PATHOGENS OF OILSEED RAPE (*BRASSICA NAPUS*)

Roman Bleha^{1*}, Jan Pravda¹, Barbora Jindřichová², Lenka Burketová², Andriy Synytsya¹, Olga Valentová²

¹Department of Carbohydrates and Cereals, Faculty of Food and Biochemical Technology, University of Chemistry and Technology Prague, 16628 Prague, Czech Republic

²Department of Biochemistry and Microbiology, Faculty of Food and Biochemical Technology, University of Chemistry and Technology Prague, 16628 Prague, Czech Republic

*Corresponding author: blehar@vscht.cz

ABSTRACT

The fungi *Alternaria brassicicola* and *Leptosphaeria maculans* cause blackleg and dark leaf spot on most Brassica species, including economically important oilseed rape (*Brassica napus*). Several types of phytotoxins synthesised by these fungi were isolated from infected plants. Previously it has been found that metabolites of *L. maculans* may induce expression of a pathogenesis related (*PR1*) gene, H_2O_2 accumulation, and may enhance resistance of *B. napus* plants toward fungal infection [1]. Biochemical composition of these fungi is still poorly investigated. This study is devoted to the isolation of biological active compounds including polysaccharides from *A. brassicicola* and *L. maculans* mycelia that were fractionated by subsequent extractions with hexane, aqueous ethanol (80%), hot water (100 °C) and aqueous 1M NaOH. The hot water soluble fractions were then treated with amylolytic and proteolytic enzymes to remove ballast compounds. Obtained fractions were characterised by FTIR, FT Raman, 1H and ^{13}C NMR spectroscopy. Molecular mass

of polymeric components (proteins, polysaccharides) was analysed by GPC. Sugar composition analysis was made by total hydrolysis (0.5M TFA, 100 °C for 1 h) and GC-FID of sugar derivatives. Both fungal species were found to be the sources of bioactive carbohydrates including mannitol, D-galactofuranose containing oligosaccharides and cell wall β -glucans.

Financial support from the Ministry of Education, Youth and Sport of the Czech Republic (project LD14093) is greatly acknowledged.

- [1] Kim PD, Šašek V, Burketová L, Čopíková J, Synytsya A, Jindřichová B, et al. Cell wall components of *Leptosphaeria maculans* enhance resistance of *Brassica napus*. *Journal of Agricultural and Food Chemistry* 2013; 61: 5207-5214.

5P03

STANOVENÍ ANTIOXIDAČNÍ AKTIVITY LUTEINU

Barbora Hrvolová¹, Lenka Portychová^{2,3}, Dana Vaněrková², Jiří Kalina¹

¹Ostravská univerzita v Ostravě, přírodovědecká fakulta, katedra chemie, 30. dubna 22, 701 03, Ostrava, Česká republika, b.hrvolova@seznam.cz

²RADANAL s.r.o, Institut nutrice a diagnostiky, Okružní 613, 530 03, Pardubice, Česká republika

³Univerzita Palackého, katedra analytické chemie, 17. listopadu 12, 771 46, Olomouc, Česká republika

Lutein patří ke karotenoidům, významným bioaktivním látkám mnoha biologických systémů, ve kterých plní různorodé funkce (pigmentační, antioxidační, fotoprotektivní) [1]. Molekula luteinu obsahuje systém konjugovaných dvojných vazeb, díky kterému je schopna vytvářet geometrické isomery *all-trans* a 9-*cis*-, 9'-*cis*-, 13-*cis*-, 13'-*cis*-, 15-*cis* a 15'-*cis*-isomery [2]. Jednotlivé isomery se liší ve struktuře, čímž se vzájemně liší i jejich fyzikálně chemické vlastnosti i jejich antioxidační aktivita. Antioxidační aktivita byla stanovena pro komerčně dostupný standard luteinu v *all-trans* formě, pro laboratorně připravenou směs luteinu obsahující jak *all-trans* formu tak i *cis* isomery [3] a pro lutein extrahovaný z rostlinného materiálu. Pro stanovení byla použita metoda DPPH, což je jedna ze základních metod pro zhodnocení antiradikálové aktivity čistých látek a různých směsných vzorků, a dále metoda ABTS, která bývá rovněž označována i jako metoda TEAC. Metoda ABTS se používá ke stanovení celkové antioxidační aktivity. Antioxidační

vlastnosti vzorků luteinu byly analyzovány rovněž pomocí vysokoúčinné kapalinové chromatografie s elektrochemickou detekcí (HPLC/ECD). Do aktuálně velmi oblíbených potravinových doplňků se přidává lutein ve své *all-trans* formě. Z hlediska expirace daného doplňku se hodnotí pouze obsah *all-trans* formy. *Cis* isomery, jenž jsou považovány za degradační produkty, však mohou vykazovat shodné a ne-li lepší antioxidační vlastnosti.

Práce vznikla v rámci řešení projektu LO1208 "TEWEP" za finanční podpory MŠMT v rámci programu NPU I a dále byla podpořena z projektu Studenstké grantové soutěže, číslo projektu SGS06/PřF/2015.

- [1] Ausich R., Newman J., Ueltschy A., Johnson H., Sheabar F.Z., Dann R., Emmick T. Process of converting trans lutein into cis lutein and the uses thereof. Patent application publication 10/331:801 (2004).
[2] Šivel M., Klejdus B., Kračmar S., Kubáň V. LUTEIN – významný karotenoid ve výživě člověka. *Asociace českých chemických společností, Chemické Listy* 107, (2013), 456-463.
[3] Kalina J., Hrvolová B. Utility model, n. 22157: Equipment for isomerisation of carotenoids, 2011

5P04

OXIDÁCIA TOKOFEROLOV V OLEJOCH VYSTAVENÝCH FRITOVACÍM TEPLITAM

Zuzana Burčová¹, František Kreps¹, Štefan Schmidt¹, Stanislav Sekretár¹

¹Oddelenie potravinárskej technológie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Radlinského 9, 81237 Bratislava, z.burcova@gmail.com

Práca je zameraná na výskum degradácie mastných kyselín, tokoferolov a na vznik ich oxidačných produktov pri podmienkach vyprážania (180 °C). Slniečnicový a repkový olej sme ohrievali pri podmienkach fritovania a povrchového vyprážania. Stanovením obsahu VMK, hydroperoxidov, polohových izomérov a polymérov sme určili rozsah degradácie mastných kyselín. Ďalej sme v ohrievaných rastlinných olejoch stanovili úbytok alfa-tokoferolu a potvrdili sme vznik alfa-tokoferyl chinónu pri podmienkach fritovania a povrchového vyprážania. Z výsledkov našej práce vyplýva, že úbytok alfa-tokoferolu a vznik alfa-tokoferyl chinónu ovplyvňuje nielen styčná plocha oleja so vzdušným kyslíkom a množstvo

oleja použitého pri ohreve, ale aj nenasýtenosť oleja. Najvýraznejší úbytok alfa-tokoferolu sme stanovili v slnečnicovom oleji, ktorý bol prebublávaný vzduchom a v oleji ohrievanom na panvici vo výške 3 mm. V týchto olejoch bol zároveň pozorovaný veľmi rýchly nárast obsahu alfa-tokoferyl chinónu.

Prínosom našej práce bolo vyvinutie metódy na kvantitatívnu analýzu alfa-tokoferolu a alfa-tokoferyl chinónu v ohrievaných olejoch v jednom kroku bez použitia zdĺhavej predúpravy vzorky a skúmanie ich vzniku v ohrievaných olejoch.

Kľúčové slová: alfa-tokoferol; alfa-tokoferyl chinón; fritovanie; povrchové vyprážanie.

Podakovanie:

Riešenie tejto práce bolo realizované aj vďaka podpore v rámci riešenia projektu APVV 0850-11 a APVV-14-0393 financovaného Agentúrou na podporu výskumu a vývoja (APVV), Slovensko a aj vďaka podpore v rámci riešenia projektov VEGA-1/0860/13, VEGA 1/0975/12, VEGA 1/0539/13 financovaných Slovenskou vedeckou grantovou agentúrou (VEGA).

5P05

VPLYV VYSOKOTEPLOTNÉHO OHREUV RASTLINNÝCH OLEJOV NA DEGRADÁCIU TOKOFEROLOV

František Kreps¹, Zuzana Burčová¹, Štefan Schmidt¹
Stanislav Sekretár¹

¹Oddelenie potravinárskej technológie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Radlinského 9, 81237 Bratislava, frantisek.kreps@stuba.sk

Práca je zameraná na komplexný výskum degradácie mastných kyselín a najmä tokoferolov v rastlinných olejoch za podmienok dezodorizácie a fritovania. Obsah alfa-tokoferolu, alfa-tokoferyl chinónu a alfa-tokoferyl MK sme stanovovali v rastlinných olejoch ohrievaných pri teplote fritovania (180 °C) a v laboratórne dezodorizovaných olejoch (260 °C). Z výsledkov našej práce vyplýva, že tokoferoly reagujú s mastnými kyselinami pri vysokých teplotách za vzniku esterov tokoferolov (tokoferyl MK). Tokoferyl MK v slnečnicových olejoch ohrievaných pri teplote 180 °C vznikajú pomalšie ako alfa-tokoferyl chinón. Pri dezodorizačnej teplote 260 °C to bolo naopak a rýchlejšie vznikali tokoferyl mastných kyselín ako alfa-tokoferyl chinón, ktorý sa vplyvom teploty degradoval. V olejoch sme stanovovali obsah hydroperoxidov, trans izomérov, polohových

izomérov mastných kyselín a polymérov, ktoré ovplyvňovali degradáciu tokoferolov.

Prínosom pre doterajšie poznatky je vyvinutie metódy vhodnej na kvantitatívnu analýzu tokoferyl MK. Ide o prvú prácu potvrdzujúcu vznik esterov tokoferolov s voľnými mastnými kyselinami v rastlinných olejoch ohrievaných pri teplote fritovania a dezodorizácie.

Kľúčové slová: vysokoteplotný ohrev; alfa-tokoferol; alfa-tokoferyl chinón; alfa-tokoferyl mastných kyselín.

Podakovanie:

Riešenie tejto práce bolo realizované aj vďaka podpore v rámci riešenia projektu APVV 0850-11 a APVV-14-0393 financovaného Agentúrou na podporu výskumu a vývoja (APVV), Slovensko a aj vďaka podpore v rámci riešenia projektov VEGA-1/0860/13, VEGA 1/0975/12, VEGA 1/0539/13 financovaných Slovenskou vedeckou grantovou agentúrou (VEGA).

5P06

ODSTRANĚNÍ VYBRANÝCH NESTEROIDNÍCH ANTIREVMATIK POMOCÍ HETEROGENNÍ FOTOKATALÝZY

Vojtěch Trousil¹, Zuzana Blažková¹, Eva Slehová¹, Jiří Palarčík¹, Oldřich Machalický², Jiří Cakl¹.

¹Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice

²Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice

Léčiva patří mezi mikropolutanty v životním prostředí, která mohou negativně ovlivňovat kvalitu vody a svým toxickým účinkem působit na vodní organismy. Přestože se jejich množství v životním prostředí pohybuje v řádech ng/l - µg/l, jedné se o velice nebezpečné polutanty díky jejich strukturní stabilitě a biologické aktivitě [1].

Nesteroidní antirevmatika patří mezi ty látky, jejichž spotřeba je jedna z nejvyšších na světě. V lidském těle způsobují inhibici enzymů cyklooxygenáz, v životním prostředí je jejich mechanismus účinku dosud nejasný. Bylo však potvrzeno, že ve vodních ekosystémech způsobují např. inhibici koryšoveců či ztrátu chlorofylu řas a vodních rostlin. U ryb byly též popsány malformace orgánů [2].

Tato práce se zaměřila na odstranění čtyř léčiv ze skupiny nesteroidních protizánětlivých antirevmatik (ibuprofenu, paracetamol,

diklofenaku a naproxenu) z modelové odpadní vody. Tyto látky byly odstraňovány metodou heterogenní fotokatalýzy ve vsádkovém reaktoru. Současně byl studován vliv pH a přídavku peroxidu vodíku H_2O_2 na konverzi léčiv.

Autoři děkují Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy za finanční podporu (SGSFCHT_20015006)

- [1] FATTA-KASINOS, Despo. Pharmaceutical residues in environmental waters and wastewater: current state of knowledge and future research. *Analytic Bioanalytic Chemistry*. 2011, č. 399
- [2] CLEUVERS, Michael. Mixture toxicity of the anti-inflammatory drugs diclofenac, ibuprofen, naproxen and acetylsalicylic acid. *Ecotoxicology and environmental safety*. 2004, roč. 59

5P07

VLIV VYBRANÝCH TĚŽKÝCH KOVŮ NA RŮST *ACIDITHIOBACILLUS FERROOXIDANS*

Eva Slehová¹, Zuzana Blažková¹, Miloslav Slezák¹, Jiří Palarčík¹

¹Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Studentská 95, 532 10 Pardubice, eva.slehova@upce.cz

Acidithiobacillus (A.) *ferrooxidans* je obligátně chemolitotrofní bakterie, která je frekventovaně izolována z kyselých důlních vod s vyšším obsahem síry nebo železa. Jedná se o pohyblivou, acidofilní, nesporulující gramnegativní tyčinku, jež získává energii oxidací Fe(II) nebo redukovaných anorganických sirných sloučenin. Současně je tato bakterie schopna oxidovat molekulární vodík či kyselinu mravenčí. Jako zdroj C využívá atmosférický CO_2 [1,2].

A. ferrooxidans přispívá díky svému oxidačnímu metabolismu ke zrychlení některých chemických procesů, které vedou k okyselení prostředí. Následkem je pak migrace těžkých kovů, vůči nimž vykazuje *A. ferrooxidans* toleranci i ve vysokých koncentracích. Proto se uvedený mikroorganismus z hlediska biotechnologického významu nejvíce uplatňuje v komerční extrakci kovů z jejich bohatých i chudších rud a nerostných koncentrátů.

Cílem práce bylo zjistit vliv vybraných těžkých kovů na růst bakterie *A. ferrooxidans*. Současně byla ověřována schopnost uvedeného mikroorganismu tvořit bakteriální biofilm.

- [1] D.E.Rawlinga: *Annu Rev Microbiol*, (2002)

- [2] S.S.R. Mahapatra, A.K. Mishra: *Curr. Microbiol*, (1984)

5P08

ZVYŠOVÁNÍ EFEKTIVITY ODBOURÁVÁNÍ FOSFORU U DČOV

Libor Dušek¹, Veronika Kočanová¹

Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10, Pardubice, Česká republika, libor.dusek@upce.cz

Práce je věnována zvyšování účinnosti odbourávání fosforu malých mechanicko-biologických domovních čistíren. Princip technologie vychází z elektrochemického rozpouštění obětované anody z vhodného materiálu, která je zdrojem kationtů vytvářející s přítomnými fosforečnany nerozpustné sloučeniny, které mohou být zachyceny v dosazovací části DČOV. Při laboratorním testování s použitím modelové splaškové vody a s využitím zmenšené poloprovozní DČOV vycházející z komerční domovní čistírny pro 4 EO byla před dočišťováním výstupní koncentrace P_{celk} na výstupu z čistírny 5-6 mg/l, což představuje cca 40-60% účinnost. Po elektrochemickém dočištění bylo dosaženo koncentrací P_{celk} na výstupu 0,5-1 mg/l, což při nátokové koncentraci $P_{celk} = 20$ mg/l představuje celkovou účinnost odstranění fosforu 95-97,5 %. Vstupní zatížení DČOV představovalo cca denní zatížení 1EO při průtoku 5,21 l/h, tedy 125 l modelové OV denně s CHSK = 630 mg/l, BSK₅ = 480 mg/l, $P_{celk} = 20$ mg/l. Během laboratorních zkoušek byly zkoušeny 3 materiály obětované anody a byly optimalizovány provozní podmínky pro jejich elektrochemické rozpouštění.

- [1] ČSN EN 12566-1 (ČSN 756404): Malé čistírny odpadních vod do 50 ekvivalentních obyvatel.
- [2] NV č. 416/2010 Sb. o ukazatelích a hodnotách přípustného znečištění odpadních vod.

5P09**AUTOTROFNÍ DENITRIFIKACE
BAKTERIÍ *THIOBACILLUS*
DENITRIFICANS PODPOROVANÁ
FOSFOREM A MOLYBDENEM**

Zuzana Blažková¹, Eva Slehová¹, Vojtěch Trousil¹, Jiří Palarčík¹, Miloslav Slezák¹, Jiří Cakl¹

¹Univerzita Pardubice, ÚEnviChI, Studentská 573, 532 10, Pardubice, Zuzana.Blazkova@upce.cz

Bakterie *Thiobacillus* (*Th.*) *denitrificans* taxonomicky řadíme do třídy *Proteobacteria*. Jedná se o gramnegativní, chemolitoautotrofní a fakultativně anaerobní mikroorganismy, které svou energii získávají oxidací elementární síry a některých jejích dalších anorganických redukovaných sloučenin. Při těchto dějích se uvolňují elektrony, které jsou za anoxických podmínek spotřebovány na redukci dusičnanových či dusitanových iontů. Takto získaná energie je dále využita k asimilaci oxidu uhličitého Calvinovým cyklem [1,2].

Bakterie *Th. denitrificans* patří mezi všeobecně rozšířené, netoxické a nepatogenní mikroorganismy, které můžeme běžně nalézt v půdě, vodě, blátě, sladkovodních i mořských usazeninách, domovních odpadních vodách, čistírnách odpadních vod, septicích a v neposlední řadě také v dolech. Z hlediska ochrany životního prostředí jde o velice důležité mikroorganismy a to z toho důvodu, že by jejich denitrifikační schopnost mohla být při vhodné zvolených podmínkách využita jako alternativní způsob odstraňování dusičnanů a dusitanů z takto kontaminovaných odpadních vod [3].

Na denitrifikační procesy bakterií *Th. denitrificans* má vliv celá řada látek a faktorů. Mezi tyto látky patří rovněž fosfor a molybden, na jejichž vliv byla zaměřena tato práce. Byla sledována účinnost autotrofní denitrifikace bakterií *Th. denitrificans* v přítomnosti fosforu a molybdenu a určena rychlost těchto procesů.

Autoři děkují Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy za finanční podporu (SGSFCHT_2015006).

- [1] D. P. Kelly, A. P. Wood.: Int J Evol Microbiol, (2000)
- [2] H. R. Beller, T. E. Letain, A. Chakicherla, S. T. Kane, T. C. Legler, M. A. Coleman: J Bacteriol, (2006)
- [3] H. S. Moon, K.-H. Ahn, S. Lee, K. Nam, J. Y. Kim: Environmental Pollution, (2003)

5P010**CYTOTOXICKÉ ÚČINKY NANOČÁSTIC
STŘÍBRA A ZLATA NA MYŠÍ
FIBROBLASTY**

Šárka Hradilová¹, Aleš Panáček¹, Radek Zbořil¹

¹Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, Olomouc 779 00, sarka.hradilova@upol.cz

Nanotechnologie jsou považovány za velmi slibné odvětví s vysokou přidanou hodnotou, které přináší nové možnosti v různých odvětvích - od elektroniky, chemického, textilního nebo potravinářského průmyslu po farmakologii a medicínu. Nanočástice kovů představují jednu z nejdůležitějších a často používaných skupin nanočástic z důvodu jejich unikátních fyzikálních (elektronických a magnetických vlastností), chemických (optické a katalytické vlastnosti) a biologických vlastností (antimikrobiální aktivita), které se významně liší od původního materiálu. Fyzikálně chemické vlastnosti včetně toxicity jsou obecně určovány jejich velikostí, tvarem, povrchovou chemií, povrchovým nábojem, stabilitou a schopností uvolňovat ionty. Ty stejné vlastnosti, které činí nanočástice tak výjimečnými ovšem představují také potenciální riziko pro člověka a životní prostředí spojené s jejich krátkodobými a dlouhodobými možnými toxickými účinky. Například vysoký poměr povrchu k objemu nanočástic zvyšuje jejich reaktivitu, což je dobré pro účely katalýzy, ale riskantní při kontaktu s živými systémy. Velký počet in vitro studií ukazuje, že nanočástice kovů jsou toxické pro savčí buňky. Naše studie porovnává toxické účinky nanočástic stříbra, které je obecně považováno za toxické, s nanočásticemi zlata, které jsou označovány jak za toxické, tak i neškodné pro eukaryotické buňky. Byly sledovány cytotoxické účinky obou typů nanočástic na myších buňkách a značná pozornost byla věnována i mechanismu cytotoxicity.

Tato práce vznikla za podpory projektu LO1305 Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky, Grantové agentury České republiky (projekt No.15-22248S) a Interního grantu University Palackého v Olomouci (PrF_2015_022).

5P11**ODSTRANĚNÍ CHROMU(VI) Z ROZTOKU POMOCÍ STRUSEK**

Lenka Bláhová¹, Zuzana Navrátilová¹

Ostravská univerzita v Ostravě, KCH, PŘF, 30.dubna 22,70103 Ostrava, lenka.blahova23@gmail.com

Strusky, jako sekundární produkty metalurgické výroby, by se mohly uplatnit nejen jako stavební materiál, ale také jako levný a vhodný sorbent pro široké rozpětí látek. V této studii bude popsáno odstranění Cr(VI) z roztoku pomocí dvou typů strusek (vysokopecní a ocelářské), které byly podrobeny následující úpravě. Byly vyluhovány destilovanou vodou (výluh 24 h a 48 h) a kyselinou (0,001 M HCl) pro získání dalších materiálů pro sorpci chromu z roztoku a pro bližší pochopení mechanismu odstranění. Samotné materiály byly podrobeny charakterizaci pomocí metod rentgenové fluorescenční spektrometrie, infračervené spektrometrie a měřením specifického měrného povrchu pomocí metody BET. Sorpční experimenty byly provedeny vsádkově s cílem zjistit optimální podmínky a následně za těchto podmínek proměřit sorpční izotermy. Prvotní experimenty zahrnovaly vliv pH, navážky a doby kontaktu. Za optimálních podmínek byly proměřeny izotermy a na jejich základě se posuzoval sorpční model dle Langmuirova a Freundlichova adsorpčního modelu. Výsledky této studie mohou sloužit k získání levného a dostupného sorbentu pro odstranění toxického Cr(VI) z roztoku.

Ráda bych poděkovala za finanční podporu katedře Chemie Ostravské univerzity v Ostravě v rámci projektu SGS08/PŘF/2015.

5P12**PLODY RAKYTNÍKA REŠETLIKOVÉHO VO VÝŽIVĚ A ZDRAVÍ ČLOVEKA**

Štefan Schmidt¹, Zuzana Burčová¹, Stanislav Sekretár¹, František Kreps¹, Milan Čertík¹

¹Ústav biotechnologie a potravinářstva, Fakulta chemické a potravinářské technologie STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, stefan.schmidt@stuba.sk

Výrobky z rakytníka rešetliakového neustále pribúdajú na trhu a tak vzniká naliehavá potreba zvýšiť povedomie konzumentov o obsahu bioaktívnych látok v plodoch tohto atraktívneho, avšak stále ešte raritného bobuľového ovocia. Hromadia sa dôkazy, že rakytník rešetliakový je sľubná rastlina, ktorá môže slúžiť ako prírodný prostriedok na zníženie rizika vzniku kardiovaskulárnych ochorení (CVD), cukrovky, zápalových ochorení, trombózy a rakoviny [1]. V tomto príspevku sa zaoberáme predovšetkým lipidmi z plodov rakytníka rešetliakového. Dužina plodov obsahuje najvyššie množstvo celkových a viazaných lipidov (fosfolipidy a glykolipidy). Charakteristická vlastnosť lipidov rakytníka rešetliakového (plod/dužina) je vysoký obsah kyseliny palmitolejovej (16:1 n-7) a úmerne k tomu obsah jej prekursoru, kyseliny palmitovej (16:0). Boli stanovené niektoré dôležité fyzikálne a chemické parametre rakytníkového oleja, ako i hodnota indukčnej periódy oxidačnej stability.

Diskutované sú i sprievodné látky rakytníkového oleja, ako sú fosfolipidy, karotenoidy, tokochromanoly (tokoferoly a tokotrienoly) a fytosteroly.

Táto práca bola podporená Slovenskou vedeckou grantovou agentúrou v rámci zmluvy č. VEGA-1/0860/13 a Slovenskou agentúrou pre výskum a rozvoj v rámci zmluvy č. APVV 0850-11 a APVV 14-0393

[1] Yan-Jun Xu, Meera Kaur, Reshvinder S. Dhillon, Paramjit S. Tappia, Naranjan S. Dhalla: Journal of Functional Foods 3 (2011) p. 2–12.

PREDNÁŠKY - SEKCIA 6 CHEMPROGRESS

6P01

PEM ELEKTROLÝZA VODY – ASPEKTY SPOJENÉ S OPTIMALIZACÍ ANODY

Karel Bouzek¹, Jakub Polonský¹, Tomáš Bystroň¹

¹Ústav anorganické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, karel.bouzek@vscht.cz

Elektrolýza vody představuje nedílnou součást soustavy technologií nazývaných souhrnně jako vodíková ekonomika určených pro stabilizaci rozvodné elektrické sítě a současně pro skladování a účelné využití elektrické energie produkované obnovitelnými zdroji v období nadprodukce. PEM elektrolýza, tj. elektrolýza založená na využití protonově selektivního polymerního elektrolytu (PEM), představuje verzi procesu elektrolýzy vody umožňující účinnou, flexibilní a intenzivní realizaci tohoto procesu.

S ohledem na zvýšení potenciálu uvedené technologie pro široké praktické využití je nezbytné snížit její pořizovací náklady dané ze značné míry použitím IrO₂ jako anodového katalyzátoru. Pozornost se soustředí zejména na zvýšení stupně využití katalyzátoru a tím na snížení nezbytných nákladů drahého kovu. I když lze při optimalizaci konstrukce tohoto elektrolýzoru vycházet ze zkušeností získaných při vývoji technologie palivových článků typu PEM, reverzní průběh elektrodových reakcí klade výrazně vyšší nároky na použité materiály. Nejvýraznější problém pak představuje anoda, která kombinuje vysoký oxidační potenciál se silně kyselým prostředím a přítomností atomárního kyslíku. V rámci předkládaného příspěvku bude prezentováno porovnání konstrukce anody používané v palivových článcích typu PEM s technologií elektrolýzy vody. Důraz bude kladen zejména na používané materiály a jejich dopady na účinnost procesu, případně na omezení, která z výše uvedených důvodů vznikají při konstrukci anody, či celé elektrolýzní cely.

Tento výzkum probíhá za finanční podpory Grantové agentury České republiky v rámci projektu číslo15-02407J.

6P02

DISTRIBUCE PROUDU V PILOTNÍ ELEKTRODIALÝZNÍ JEDNOTCE – VLIV PRŮTOČNÉHO USPOŘÁDÁNÍ A NESYMETRIE PROVOZNÍCH PODMÍNEK VSTUPNÍCH ROZTOKŮ

Michal Němeček¹, Roman Kodým¹, Karel Bouzek¹, Dalimil Šnita²

¹VŠCHT Praha, Ústav anorganické technologie, Technická 5, 166 28 Praha 6 - Dejvice, Česká republika, nemeckm@vscht.cz

²VŠCHT Praha, Ústav chemického inženýrství, Technická 3, 166 28 Praha 6 - Dejvice, Česká republika

Rovnoměrnosti distribuce hmoty a náboje jsou zásadními faktory rozhodujícími o výkonu, účinnosti a životnosti zařízení pro elektrodialýzu (ED). ED je elektro-membránový separační proces, při němž dochází k selektivnímu transportu disociovaných částic mezi proudy roztoků přes iontově-selektivní membrány. Vzhledem k rostoucímu uplatnění tohoto procesu nejen při přípravě pitné vody, ale taktéž v potravinářství při úpravě kyselosti či odsolování, při regeneraci oplachových vod z galvanoven nebo při regeneraci kyselin a zásad, vyvstává potřeba extenzitního i intenzitního navýšení výkonu zařízení. V tomto smyslu dochází k optimalizaci průtočných komor (rozdělovačů) a navýšování jejich počtu. Tyto konstrukční úpravy jsou však často spjaté s rizikem zhoršení rovnoměrnosti hydrodynamiky toku a návazně i proudové hustoty, které může vést k nákladným haváriím. V této souvislosti tak vyvstává potřeba hlubšího pochopení vztahů mezi distribucí toku jednotlivých veličin a provozními podmínkami v průmyslovém měřítku.

Distribuce proudové hustoty byla experimentálně stanovována na pilotní ED jednotce v souvislosti s provozními uspořádáními procesu. Předmětem práce je především srovnání uspořádání souproutového vs. protiproutového a provozů s průtokově a koncentračně nesymetrickými vstupními roztoky (diluátů vs. koncentrátů), v poměrech průtoků 1:1–1:4 a poměrech koncentrací až 1:1–1:20 z hlediska dopadu na distribuci proudové hustoty podél pilotní jednotky. Tato se skládá ze 200 vertikálně orientovaných membránových párů tvořených membránami Ralex[®] o aktivní ploše 0,635 × 0,315 m² oddělených síťovými rozdělovači. Maximální parametry dosahují hodnot 10 m³ h⁻¹ na každý vstupní proud, až 20 kg m⁻³ Na₂SO₄ jako modelového roztoku, až

360 V vloženého napětí na segmentované Ti/Pt elektrody.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č.20/2015) a Grantovou agenturou ČR v rámci projektu č. 14-17351P.

- [1] Pánek, P.; Kodým, R.; Šnita, D.; Bouzek, K. Spatially two-dimensional mathematical model of the flow hydrodynamics in a spacer filled channel – effect of inertial forces. *J. Membr. Sci.* **2015**,
- [2] Kodým, R.; Drakselová, M.; Pánek, P.; Němeček, M.; Šnita, D.; Bouzek, K. Novel approach to mathematical modeling of the complex electrochemical systems with multiple phase interfaces. *Electrochim. Acta* **2015**

6P03

ANALÝZA ROVNOMĚRNOSTI TOKU HMOTY A NÁBOJE VE SVAZKU VYSOKOTEPLTNÍHO PALIVOVÉHO ČLÁNKU TYPU PEM POMOCÍ MATEMATICKÉHO MODELU

Monika Drakselová¹, Roman Kodým¹, Dalimil Šnita², Karel Bouzek¹

¹Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav anorganické technologie, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká Republika, drakselm@vscht.cz

²Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav chemického inženýrství, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká Republika

Matematické modelování svazku vysokoteplotních palivových článků s polymerní membránou jako elektrolytem (HT PEM FC) se dostává do popředí dnešního výzkumu. Matematický model umožňuje lepší pochopení systému na lokální úrovni a usnadňuje jeho optimalizaci. Tradiční modelový přístup popisující jednotlivé vrstvy každé z cel svazku je však velmi náročný na výpočetní čas a hardware. Tato práce prezentuje inovativní přístup [1] k matematickému popisu HT PEM FC průmyslových rozměrů. Tento modelový přístup popisuje celý svazek jako makrohomogenní kontinuum. Díky tomu se výrazně snižují výpočetní nároky.

V rámci této práce byl navrhnout trojrozměrný stacionární model vysokoteplotního palivového článku typu PEM se 100 celami. Jsou uvažovány isothermní podmínky (teplota 160 °C). Modelové rovnice zahrnují materiálové bilance, bilance hmoty a náboje. Anisotropie systému je popsána pomocí anisotropních transportních parametrů: (i) permeabilita; (ii) difuzní koeficient; (iii) specifická vodivost. Popis transportu plynů v palivovém článku byl založen na teorii

ideálního plynu. Konvektivní tok pak byl popsán Darcyho zákonem. Oxidace vodíku je považována za výrazně rychlejší, než katodická reakce. Příspěvek této reakce k celkovému přepětí na článku je tudíž zanedbán. Naproti tomu kinetika redukce kyslíku je popsána kinetickou rovnicí Butlerova-Volmerova typu. Výsledný systém parciálních diferenciálních rovnic byl řešen metodou konečných prvků v prostředí softwaru COMSOL Multiphysics®.

Tento výzkum je financován FCH JU v rámci grantové smlouvy č. 325262 a MŠMT ČR v rámci projektu č. 7HCX13001.

- [1] Roman Kodým, Monika Drakselová, Petr Pánek, Michal Němeček, Dalimil Šnita, Karel Bouzek: *Novel approach to mathematical modeling of the complex electrochemical systems with multiple phase interfaces*, *Electrochimica Acta*, (2015), In press

6P04

PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE VODÍKOVOU ELEKTRODOU NESENÝCH ČLÁNKŮ PRO PROCES VYSOKOTEPLTNÍ ELEKTROLÝZY VODY

Filip Karas, Martin Paidar, Karel Bouzek

Vysoká škola chemicko-technologická v Praze (Ústav anorganické technologie), Technická 5, Praha 6 – Dejvice, 166 28, karasf@vscht.cz

Vysokoteplotní elektrolýza vody představuje perspektivní technologii výroby vodíku, která má značný potenciál hrát v budoucnu významnou roli v oblasti energetiky. Vysokoteplotní proces má oproti nízkoteplotnímu řadu výhod. Mezi ty hlavní patří zejména vysoká účinnost, nižší spotřeba elektrické energie a možnost provozu zařízení v reverzibilním módu, tj. jak v režimu elektrolýzy, tak palivového článku.

I přes to, že vysokoteplotní elektrolýza vody má řadu výhod, její komerční využití zatím není možné. Největší překážku paradoxně představuje vysoká provozní teplota (~800 °C). Ta klade vysoké nároky na použité materiály, a to jak konstrukční, tak na materiály určené pro výrobu vlastních elektrochemických článků.

Cílem této práce je představit způsoby výroby článků pro vysokoteplotní elektrolýzu vody a jejich následné charakterizace. Za nejslibnější metody přípravy je dnes považován sítotisk a odlévání. Elektrochemická charakterizace připravených článků zahrnuje zejména měření zátěžových křivek a elektrochemických

impednačních spekter, která umožňují určit jejich základní charakteristiky. Další významný parametr představuje životnost článků stanovená pomocí dlouhodobých testů. Vedle elektrochemických charakteristik poskytuje důležité informace rovněž analýza mikrostruktury (např.: pomocí elektronového mikroskopu), která umožňuje například identifikovat degradační děje, ke kterým došlo v průběhu provozu článku.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č.20/2015) a z prostředků TA ČR v rámci projektu číslo TA01020930.

6P05

ALKALICKÁ ELEKTROLÝZA VODY VYUŽÍVAJÍCÍ ANION SELEKTIVNÍ POLYMERNÍ MATERIÁLY OBSAHUJÍCÍ DABCO FUNKČNÍ SKUPINY

Jaromír Hnat¹, Jan Žitka², Martin Paidar¹, Karel Bouzek¹

¹Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav anorganické technologie, Technická 5, 166 28, Česká republika; +420 220 444 009; e-mail: hnatj@vscht.cz;

²Ústav makromolekulární chemie, Akademie věd ČR v.v.i., Heyrovského náměstí 2, 162 06, Praha 6

Alkalická elektrolýza vody představuje průmyslovou technologii výroby vodíku, která však nebyla po několik dekád významněji rozvíjena. Za konkurenčními technologiemi elektrolytického rozkladu vody tak výrazně zaostává v intenzitě produkce, účinnosti i flexibilitě. Právě nižší flexibilita je důvodem pro neaplikovatelnost současné alkalické elektrolýzy vody k vyrovnávání kolísavých dodávek elektrické energie do rozvodné sítě z obnovitelných zdrojů. Na druhou stranu, umožňuje alkalický způsob rozkladu vody využívat dostupné a tedy relativně levné elektrodové materiály. K dosažení vyšší flexibility je zejména nutné snížit koncentraci běžně používaného kapalného elektrolytu (až 30 hm.% KOH). Snížení koncentrace kapalného elektrolytu je možné docílit náhradou současného anorganického separátoru anion selektivní polymerní membránou. Takové membrány jsou často založené na trimethylbenzyl amoniové (TMB) funkční skupině. Trimethylamin, používaný během syntézy je však podezřelý z karcinogenity. Jednou z možných náhrad TMB funkčních skupin je 1,4-diazabicyklo oktan (DABCO). Tento typ funkčních skupin byl použit při přípravě homogenní anion selektivní membrány založené

na blokovém kopolymeru poly(styren-etylen-butyleen-styren) (PSEBS) v rámci této práce. Nově připravená membrána byla testována s ohledem na její elektrochemické vlastnosti jako je iontově výměnná kapacita a iontová vodivost, stabilitu za podmínek alkalické elektrolýzy vody i jako pojivo katalytické vrstvy na elektrodách.

Poděkování: Tato práce vznikla za finanční podpory Technologické agentury České republiky v rámci projektu č. TA03010594.

6P06

THIN-FILM METHOD FOR HIGH TEMPERATURE PEM FUEL CELL CATALYST CHARACTERIZATION

Martin Prokop¹, Adam Giurg¹, Tomáš Bystron¹, Martin Paidar¹, Karel Bouzek¹

¹VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha, prokopm@vscht.cz

Among green technologies for energy conversion the high temperature polymer electrolyte fuel cell (HT PEM FC) stands out as a vital part of the hydrogen economy. Its advantages are rapid electrochemical reaction kinetics, good heat and water management and last but not least good resistance against CO poisoning.

Pt based catalyst is crucial for the proper HT PEM FC operation. It usually consists of Pt nanoparticles on the carbon black support. Quality of the catalyst depends on its electrochemically active surface area and activity for given electrode reaction. These parameters could be determined by the thin-film method combined with voltammetric measurements.

Since oxygen reduction reaction is the major limiting factor of HT PEM FC performance, the aim of our work was determination of its real kinetics on commercial electrocatalyst. Unlike the majority of the scientific works we used thin-film method on rotating-disc electrode under conditions relevant to HT PEM FC operation, i.e. in the concentrated H₃PO₄ at 160 °C. The impact of different binders and operational regimes was tested. Results obtained with the commercial catalyst were compared with those for bulk Pt.

Financial support of this project by FCH JU within the framework of project No: 325368, by MSMT CR within the framework of project No: 7HX13002 and from specific university research (MSMT No 20/2015) are gratefully acknowledged.

6P07**PERMEACE VODÍKU MEMBRÁNOU NAFION® 117 PŘI PEM ELEKTROLÝZE VODY**Jakub Mališ¹, Martin Paidar¹, Karel Bouzek¹¹Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 25 Praha 6, jakub.malis@vscht.cz

Vodíková ekonomika je jedním z konceptů skladování elektrické energie, jejíž spotřeba a výroba musí být v rovnováze. Okamžitý výkon obnovitelných zdrojů není dán spotřebou energie, ale povětrnostními podmínkami, kdy v důsledku nerovnováhy mezi produkcí a spotřebou dochází k destabilizaci rozvodné sítě. Skladování elektrické energie ve formě vodíku se tak jeví jako perspektivní řešení tohoto problému. Klíčovým krokem je samotná transformace elektrické energie na vodík procesem elektrolýzy vody.

Existují tři možnosti, jak realizovat elektrolýzu vody: alkalická, kyselé a vysokoteplotní. Vysokoteplotní elektrolýza zatím neopustila laboratoře. Alkalická elektrolýza je proces, který byl vyvinut na začátku 20. století, pro který jsou typické rozměrné instalace, jež jsou vhodné pro ustálený provoz. Kyselé (PEM) elektrolýza vyniká malými kompaktními jednotkami s vysokou účinností a výkonem, jež jsou schopné snadno operativně měnit výkon. Z tohoto důvodu je PEM elektrolýza vhodná pro vodíkovou ekonomiku.

Elektrodové prostory PEM elektrolýzérů jsou odděleny perfluorovanou sulfonovanou membránou, jež vykazuje jistou permeabilitu pro produkované plyny. Z bezpečnostních důvodů je nutné zabránit tvorbě směsi obsahující 3,8 %_v vodíku v kyslíku, aby nedošlo k tvorbě třaskavé směsi.

V rámci této práce byla studována permeace vodíku membránou Nafion® 117 při PEM elektrolýze vody za různých teplot, tlaků a proudových hustot.

6P08**VYUŽITÍ IONTOVÉ VÝMĚNY PRO ODSTRAŇOVÁNÍ KYSELÝCH BARVIV Z ODPADNÍCH VOD**Tomáš Weidlich¹, Jana Martinková¹, Miroslav Šimek¹¹Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Skupina chemických technologií, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, tomas.weidlich@upce.cz

V rámci příspěvku budou popsány výsledky výzkumných prací zaměřených na čištění odpadních vod z výroby a aplikace barviv s využitím iontových kapalin.

Účinné a ekonomicky schůdné odstraňování ve vodě dobře rozpustných kyselých barviv z odpadních vod je stále předmětem zájmu řady výzkumných týmů. Obvykle navrhovaným postupem čištění je použití adsorpce nebo chemické oxidace, obě tyto metody však bývají provozně velmi nákladné. Jinou možností je využít pro odstranění kyselých barviv z vod iontovou výměnu na anexech, tato technika však naráží na velmi obtížnou regenerovatelnost takto použitých iontoměničů.

Na našem pracovišti byla úspěšně ověřena možnost iontové výměny s použitím kapalných iontoměničů na bázi iontových kapalin [1, 2], které díky tvorbě ve vodě málo rozpustného iontového páru (viz. Schéma 1) umožňují snadnou separaci barviv z vodných roztoků ve formě ve vodě nerozpustné organické fáze.

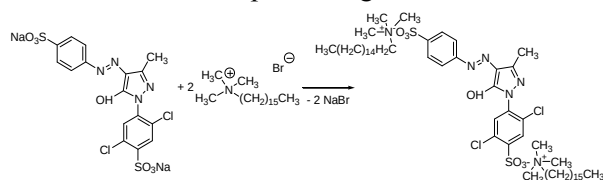


Schéma 1: Tvorba ve vodě málo rozpustného iontového páru cetyl(trimethyl)amonium-bromidu a barviva Acid Yellow 17.

Účinnost odstraňování kyselých barviv z vod tímto postupem závisí na druhu a množství použité iontové kapaliny, ale na rozdíl od použití adsorpce je tato technika v širokém rozsahu nezávislá na pH čištěných odpadních vod.

- [1] Tomáš Weidlich, Jana Martinková: Sep. Sci. Technol. (2012), 47, 1310-1315.
- [2] Martinková J., Weidlich T.: Způsob srážení barviv z vodných roztoků. CZ20120359 (2013).

POSTERY - SEKCE 1

ANALYTICKÁ A FYZIKÁLNÍ CHÉMIE

1Po01

SENZOR NA BÁZI ZLATÝCH NANOČÁSTIC K IN VIVO DETEKCI DNA A JEJÍHO POŠKOZENÍ POMOCÍ POVRCHEM ZESÍLENÉ RAMANOVY SPEKTROSKOPIE.

Anna Balzerová, Markéta Havrdová, Václav Ranc

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

Stanovení DNA, případně i určení míry poškození, patří bezesporu k důležitým diagnostickým testům. V současnosti se k detekci nejčastěji používají techniky zahrnující vysokoúčinnou kapalinovou chromatografii v kombinaci s hmotnostní spektrometrií, elektrochemické metody, elektroforézu (COMET assay), často též enzymatické (ELISA) a imunohistochemické metody (TUNEL assay) [1]. Nevýhodou výše popsaných přístupů je však jejich časté omezení u využití v *in vivo* studiích, relativně vysoké limity detekce, časová náročnost a vysoké požadavky na množství a kvalitu vzorku. Spektrální metody, včetně infračervené a Ramanovy spektroskopie nabízí zajímavé alternativy. Jednou z nich je povrchově zesílená Ramanova spektroskopie (SERS). Jedná se o rychlou metodu, která v mnoha případech poskytuje ultra-nízké detekční limity [2]. Cílem této práce je vyvinout sensor založený na funkcionalizovaných nanočásticích zlata, který bude perspektivní v detekci a studiu DNA *in vivo*, při sledování chování vybraných buněčných linií.

K přípravě sensoru byly použity zlaté nanočástice (AuNPs) o velikostech v jednotkách nm, připravené redukcí chlorozlatité kyseliny tetrahydridoboritanem sodným v přítomnosti polyvinylpyrrolidonu jako stabilizátoru. Za pomoci kombinace záporného povrchového náboje a malé velikosti částic dochází k jejich zakonzentrování v buněčném jádře, kde je DNA na základě charakteristického spektra následně detekována. Připravené AuNPs byly následně též

funkcionalizovány pomocí fluorescenční značky Cy-5, která umožňuje dosáhnout limitů detekce řádově v pmol.L^{-1} .

Autoři děkují za podporu projektu LO1305 Ministerstva mládeže, školství a tělovýchovy České republiky.

[1] V. V. Didenko, DNA Damage Detection in situ, ex vivo, and in vivo: Methods and Protocols, 2011.

[2] M. Vendrell, K.K. Maiti, K. Dhaliwal, Y.-T. Chang, Surface-enhanced Raman scattering in cancer detection and imaging., Trends Biotechnol. 31 (2013) 249–57.
doi:10.1016/j.tibtech.2013.01.013.

1Po02

VÝVOJ METODY PRO MONITOROVÁNÍ TRYPTOFANU A JEHO METABOLITŮ V BIOLOGICKÝCH MATRICÍCH JEDINCŮ S IMUNITNÍ DYSREGULACÍ A LATENTNÍ FORMOU TOXOPLAZMÓZY

Lukáš Filip¹, Jana Vondroušová¹, Kamila Syslová¹,
Petr Kačer¹

¹Vysoká škola chemicko-technologická v Praze,
Technická 5,166 28 Praha 6, filipu@vscht.cz

Cílem předkládané práce bylo vyvinout vysoce selektivní a senzitivní analytickou metodu na bázi kapalinové chromatografie s hmotnostní detekcí pro stanovení neurotransmiterů (dopaminu, serotoninu, γ -aminomáselné kyseliny a glutamátu), tryptofanu a jejich metabolitů (3,4-dihydroxyfenyloctová kyselina, homovalinová kyselina, 3-methoxytyramin, 5-hydroxyindoloctová kyselina, kynurenin, kynureninová kyselina, 3-hydroxykynurenin a chinolinová kyselina) v biologických matricích (mozková tkáň, krevní plazma). Zvýšené koncentrační hladiny těchto látek (zejména metabolitů tryptofanu, z nichž některé mají neurotoxické

účinky – např. 3-hydroxykynurenin, kyselina chinolinová) byly monitorovány při imunitní dysregulaci a latentní formě toxoplazmózy, které mohou přispět rozvoji schizofrenie a dalších patopsychologických stavů jedince. Stanovení jejich koncentračních profilů v mozkové tkáni potkanů a krevní plazmě by mělo přispět k objasnění dějů odehrávajících se v mozku při těchto patologických stavech. Vyvinutá analytická metoda se skládá ze separace analytů z biologické komplexní matrice (krevní plazma, mozková tkáň) pomocí extrakce rozpouštědly a derivatizace (účelem derivatizace je zvýšení

stability analytu a odezvy látky při ionizaci) a jejich následné detekce kombinací vysokoúčinné kapalinové chromatografie s hmotnostní spektrometrií (HPLC-ESI-MS/MS). Jednotlivé kroky analytické metody byly optimalizovány. Vyvinutá metoda byla validována a následně ověřena v animální studii, kde byly monitorovány koncentrační hladiny výše uvedených látek v krevní plazmě a mozkové tkáni u potkanů s latentní formou toxoplazmózy, imunitní dysregulací a kontrolní skupiny. Získaná data z animální studie byla statisticky vyhodnocena.

Tato práce byla financována ze strukturálních fondů EU – “Operační program Praha – Konkurenceschopnost” (Grant CZ.2.16/3.1.00/22/197), Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy České republiky “Program národní udržitelnosti I” – NPU I (LO 1215) (Grant č.: MSM-T-34807/2013) a Ministerstvem zdravotnictví České republiky (Grant č. NT 13299).

1Po03

VOTAMMETRIC DETERMINATION OF HOMOVANILLIC ACID AND VANILLYLMANDELIC ACID ON CARBON INK SCREEN-PRINTED ELECTRODE

Jan Fischer¹, Evangelia Ktena^{1,2}, Anastasios Economou², Jiří Barek¹

¹Charles University in Prague, Faculty of Science, University Research Centre UNCE “Supramolecular Chemistry”, Department of Analytical Chemistry, UNESCO Laboratory of Environmental Electrochemistry, Albertov 6, 128 43 Praha 2, Czech Republic, jan.fischer@natur.cuni.cz

²University of Athens, Department of Chemistry, Laboratory of Analytical Chemistry, Athens 15771, Greece

Homovanillic acid (HVA; 3-hydroxy-4-methoxyphenylacetic acid) and vanillylmandelic acid (VMA; hydroxy-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)acetic acid) are the major end products of catecholamine metabolism. Abnormally high levels in both plasma and urine may be indicative of a number of diseases. Commonly the VMA:HVA ratio is used as a disease marker [1]. Screen-printed electrodes can be useful for the determination of this type of compounds because of low cost, easy fabrication and simple work with small sample volume [2].

Electrochemical properties of both analytes were studied using differential pulse voltammetry (DPV) at commercial carbon ink screen-printed electrode. Optimal conditions were found for

their determination in Britton-Robinson (BR) buffer pH 3 within the concentration range from and $1 \cdot 10^{-4}$ – $8 \cdot 10^{-7}$ mol·L⁻¹. Determination of samples with content of both analytes in different ratios was explored.

Developed methods suggest fast and inexpensive possibility for screening of these important substances in biological samples.

Financial support from the Grant Agency of the Czech Republic (project P206/15/02815S) is gratefully acknowledged.

- [1] van Haard P. M. M., Wienders J. P. M., Wikkerink J. B. W.: Biomed. Chromatogr. 2, 209 (1987).
- [2] Barek J., Fischer J., Navratil T., Peckova K., Yosypchuk B., Zima J.: Electroanalysis 19, 2003 (2007).

1Po04

STANOVENÍ KYSELINY ACETYLSALICYLOVÉ VE VYBRANÝCH LÉKOVÝCH FORMÁCH TECHNIKOU SEKVENČNÍ INJEKČNÍ ANALÝZY

Hana Krátká¹, Jakub Hraníček²

¹ Biskupské gymnázium Žďár nad Sázavou, U Klafárku 3, 591 01 Žďár nad Sázavou, Česká republika, e-mail: handa.kratka@gmail.com

² Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, Hlavova 2030, 128 43 Praha 2, Česká republika, email: hranicek@natur.cuni.cz

Tato práce je zaměřena na stanovení kyseliny acetylsalicylové, která je účinnou látkou mnoha farmaceutických přípravků, pomocí rychlé a jednoduché techniky sekvenční injekční analýzy (SIA) se spektrofotometrickou detekcí.

Princip stanovení je založen na rozkladu kyseliny acetylsalicylové (nebo příslušné acetylsalicylové soli) za vzniku salicylanového iontu a jeho následné interakci s Fe³⁺ ionty v mírně kyselém prostředí, za vzniku chelátu Fe(SAL)⁺. Pro účely analytického stanovení této kyseliny se detekuje nárůst absorbance chelátu v jeho absorpčním maximu při vlnové délce 525 nm. Jako standardní látka byla použita sodná sůl kyseliny salicylové, salicylan sodný. Stanovení probíhalo na komerční aparatuře FIA Lab 3500.

Nejprve byla provedena optimalizace objemů dávkovaných reakčních složek, koncentrace reakčního činidla a průtoková rychlost při analýze. Za optimálních podmínek byly zjištěny základní charakteristiky stanovení salicylanu

sodného pomocí techniky SIA. Hodnoty základních charakteristik a obsahy analyzované látky ve vzorcích byly vyjádřeny v koncentracích mg L^{-1} . Zjištěný limit detekce salicylanu sodného činil $2,8 \times 10^{-6} \text{ mol L}^{-1}$, citlivost stanovení $1,08 \times 10^3 \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1}$ a opakovatelnost 0,97 %.

Vypracovaná metoda stanovení kyseliny acetylsalicylové byla aplikována na analýzu reálných vzorků (Acifein® 250 mg, Anopyrin® 400 mg a Acylpyrin® 500 mg), a to jak metodou kalibrační přímky, tak metodou standardního přídatku.

Tato práce byla realizována v rámci projektu Otevřená věda IV (CZ.1.07/2.3.00/45.0041)

1Po05

NMR AND DFT ANALYSIS OF 3D STRUCTURE AND SPIN-SPIN COUPLING CONSTANTS IN HEPARIN TRISACCHARIDE.

Miloš Hricovíni,¹ P.-Alexandre Driguez,² Olga L. Malkina³

¹*Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, 845 38 Bratislava, Slovakia*

²*Early to Candidate Unit, Sanofi, 1 Avenue Pierre Brossolette, 91385 Chilly-Mazarin Cedex, France*

³*Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, 845 36 Bratislava, Slovakia*

Theoretical analysis of molecular structure of heparin-trisaccharide, representing heparin repeating unit, showed that DFT method using B3LYP functional and the 6-311+G(d,p) basis set, combined with explicit solvent model, can yield sufficiently accurate structural and NMR data for heparin-like oligosaccharides. Detailed analysis of Fermi-contact contributions to $^3J_{\text{H-C-C-H}}$ indicated that important contributions arise from oxygen at both glycosidic linkages, as well as from oxygen atoms on the neighboring monosaccharide units. [1] Their contribution to the Fermi term cannot be neglected and must be taken into account for a correct description of experimental coupling constants. Computed data also showed that the magnitude of paramagnetic (PSO) and diamagnetic (DSO) spin-orbit contributions was comparable to the magnitude of the Fermi-contact contribution in some coupling constants in the central iduronic acid residue in this trisaccharide. Calculations of the localized molecular orbital contributions to the DSO terms from separate conformational residues showed that the contribution from adjacent residues is not negligible and can be important for the spin-spin

coupling constants between protons located close to the geometrical center of the molecule. These contributions should be taken into account when interpreting DSO terms in spin-spin coupling constants especially in large biomolecules.

[1] M. Hricovíni, P.-A. Driguez, O. L. Malkina: J. Phys. Chem. B 118 (2014) 11931-11942.

1Po06

STANOVENÍ ANTIBIOTIKA CEFTAZIDIMU A AMPICILINU V PERFUZÁTU Z MIKRODIALYZAČNÍ SONDY

Martin Jaček¹, Jan Polák², Radka Straková², Eva Samcová¹, Petr Tůma¹

¹*Ústav biochemie, buněčné a molekulární biologie, 3. lékařská fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Ruská 87, 100 00 Praha 10, Česká republika*

²*II.interní klinika FNKV a 3. lékařské fakulty, Univerzita Karlova v Praze, Ruská 87, 100 00 Praha 10, Česká republika, martin.jacek@volny.cz*

Při terapii bakteriálních infekcí je klíčové udržet plazmatickou hladinu antibiotika nad hodnotou tzv. minimální inhibiční koncentrace (MIC) po celou dobu léčby. Při některých onemocněních však nemusí plazmatická koncentrace antibiotika odpovídat hladině v postižené tkáni. Příkladem takového onemocnění je syndrom diabetické nohy, která je jednou z infekčních komplikací onemocnění diabetes mellitus. Je tedy důležité najít vhodný, minimálně invazivní postup stanovení koncentrace antibiotika v takto postižené tkáni. Jedním z těchto přístupů je použití mikrodializační sondy vložené do tkáně pacienta. V sondě pak dochází k přestupu látek, tedy i léčiv, obsažených v tkáni do roztoku, kterým je sonda promývána.

Cílem naší práce je optimalizovat mikrodializační postup nejprve *in vitro* a následně *in vivo* u pacientů se syndromem diabetické nohy. Pro stanovení obou antibiotik byla použita HPLC s UV detekcí při vlnové délce 260 nm pro ceftazidim a 210 nm pro ampicilin[1]. Separace probíhaly na monolytické koloně Onyx C18 (100 × 4,6 mm). Jako mobilní fáze byla použita směs acetonitrilu a 50 mM fosfátového pufru o pH = 2,4 (7:93) při průtokové rychlosti 3 ml/min. Retenční čas byl 2,18 min pro ceftazidim a 4,90 min pro ampicilin. Hodnota limitu detekce byla 0,04 µg/ml pro ceftazidim a 0,25 µg/ml pro ampicilin při dávkování 20 µl vzorku na kolonu.

Tato práce vznikla s podporou projektu GAČR 15-03139S, programu PRVOUK P31 a projektu SVV 260165/2015 Univerzity Karlovy v Praze.

[1] B.C. McWhinney et al., J. Chromatogr. B 2010, 878, 2039–2043

1Po07

CONDUCTOMETRIC STUDIES OF FORMATION OF COMPLEXES 15-CROWN-5 ETHER WITH NAI, NABR AND NACL IN H₂O - PROPAN-1-OL MIXTURES AT 298.15 K.

Zdzisław Kinart¹, Adam Bald¹,

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

Crown ethers are a group of compounds with particularly interesting properties, consisting in formation of selective complexes with metal cations. The aim of this study was to investigate the process of complexation of the sodium, bromide and iodide ions by the macrocyclic ligand 15-crown-5 in a mixture of H₂O - propanol-1-ol at 298.15K using a conductometric method. In this work, we analyzed the generally used methods for determining of the constant of complex formation (K_f) and has been shown the need for their extensive modifications.

1Po08

METAL-ORGANIC FRAMEWORKS AS MATRICES FOR MASS SPECTROMETRY OF BIOMOLECULES

Lenka Kolářová¹, Kristina Hajtmanová², Lukáš Kučera³, Petr Vaňhara³, Eladia María Peña-Méndez⁴, Jose Elias Conde⁴, Aleš Hampl³, and Josef Havel¹

¹Department of Chemistry, Faculty of Science, Masaryk University, Kamenice 5/A14, 625 00 Brno, Czech Republic 281376@mail.muni.cz

²Department of Biochemistry, Faculty of Science, Masaryk University, Kamenice 5/A5, 625 00 Brno, Czech Republic

³Department of Histology and Embryology, Faculty of Medicine, Masaryk University, Kamenice 3/A1, 62500 Brno, Czech Republic

⁴Analytical Chemistry Section, Faculty of Science, University of La Laguna, Campus de Anchieta, 38206 La Laguna, Tenerife, Spain

Metal-Organic Frameworks (MOFs) belong among new hybrid nanomaterials with porous structure consisting of a framework of metal ions and organic ligands. These coordination polymers with unique properties, such as large surface area,

tunable pore size, high porosity and high absorption capability in UV-visible range, make MOFs very prospective material in many diverse applications like adsorption of dyes, gas storage, gas separation, catalysis, drug storage and delivery, imaging, sensing, and as matrices in mass spectrometry [1, 2].

In this work, possibilities of MOFs, e.g. benzene-tricarboxylic acid and Cu²⁺ ions framework (HKUST-1, Fig. 1), to be used as possible matrices for mass spectrometry of various kinds of molecules from a simple (retinoic acid) to complex (peptides/proteins of mouse embryonic fibroblast) were examined. Either MOFs alone or in combination with classical MALDI matrices like dihydroxybenzoic acid, gold nanoparticles or other nanoparticles were extensively studied for Matrix and Surface Assisted Laser Desorption Ionization (MALDI and SALDI).

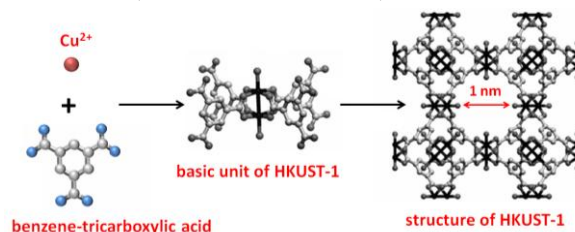


Fig. 1 Synthesis of HKUST-1(adapted from [3])

It was found that, HKUST-1 is capable of increasing the ionization and MS detection of simple organic and/or various bio-molecules. The use of MOFs presents several advantages, including lower interference of background, salt tolerance, high sensitivity and reproducibility. Further potential use MOFs might be as a concentration probe and/or staining agents, for example.

Acknowledgements

This study was supported by Grant Agency of Masaryk University (MUNI/M/0041/2013 and MUNI/A/1558/2014, MUNI/A/1014/2013) and by funds from the Faculty of Medicine MU to junior researcher (Petr Vaňhara). Grant MAT2014-57465-R (Ministry of Economy and Competitiveness, Spain) is also acknowledged.

References

- [1] Z. A. Lin, W. Bian, J.-N. Zheng, and Z. Cai: *Chem. Commun.* 51, (2015).
- [2] M. Zhao, C. Deng, X. Zhang, and P. Yang: *Proteomics* 13, (2013).
- [3] S. Bordiga, L. Regli, F. Bonino, E. Groppo, C. Lamberti, B. Xiao, P. S. Wheatley, R. E. Morris, and A. Zecchina: *Phys. Chem. Chem. Phys.* 9,(2007).

1Po09**VYUŽITIE MIKROEXTRAKČNÝCH
TECHNÍK PRE STANOVENIE
ENDOGENÝCH ESTROGÉNOV V MOČI**Elena Kupcová¹, Katarína Reiffová¹

¹Katedra analytickej chémie, Prírodovedecká fakulta,
Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach,
Moyzesova 11, 040 01 Košice,
elena.kupcova@gmail.com

Estrogény sú steroidné hormóny zodpovedné za vývoj a funkciu pohlavnej sústavy žien, pričom v menšej miere ovplyvňujú aj množstvo iných biochemických procesov v tele. Estrogény sú považované primárne za ženské pohlavné hormóny, no je málo známe, že sú v menšom množstve prítomné aj u mužov [1]. Zvýšené koncentrácie estrogénov v organizme sú spájané s rakovinovými ochoreniami prsníka, maternice [2], či prostaty, a preto je ich stanovenie v súčasnosti veľmi populárne. Estrogény sú analyzované v komplexných maticiach (environmentálne a biologické vzorky), kde sa nachádzajú vo veľmi nízkych koncentráciách (ng/l), a preto je potrebný neustály vývoj extrakčných techník zameraných na zakonzentrovanie analytu a redukciu matrix efektu. Trendom v modernej analytickej chémii je miniaturizácia analytických systémov s redukciou operačného času a súčasným zvyšovaním účinnosti.

Táto práca bola podporená grantom VVGS-2014-189.

- [1] K. Wend, P. Wend, S. A. Krum: *Front. Endocrinol.* 3 (2012) 1-14.
[2] J. Huang, J. Sun, Y. Chen, Y. Song, L. Dong, Q. Zhan, R. Zhang, Z. Abliz: *Anal. Chim. Acta* 711 (2012) 60-68.

1Po10**ANALÝZA ALKALOIDŮ V MAKOVINĚ
METODOU VYSOKOÚČINNÉ
KAPALINOVÉ CHROMATOGRRAFIE**Aneta Laryšová¹, Lenka Endlová^{1,2,3}, Viktor Vrbovský^{2,3}, Zuzana Navrátilová¹

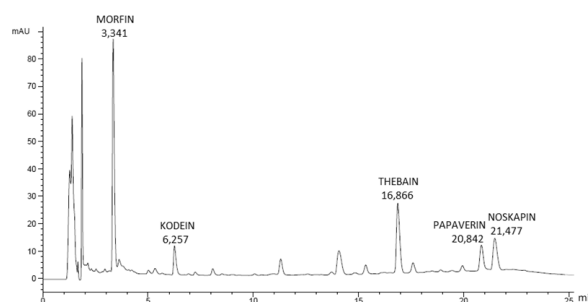
¹Ostravská univerzita v Ostravě, Přírodovědecká
fakulta, Katedra chemie, 30.dubna 22, 701 03 Ostrava,
Aneta.la@seznam.cz

²OSEVA VÝVOJ A VÝZKUM s.r.o., Hamerská 698,
756 54 Rožnov-Zubří

³OSEVA PRO s.r.o., Purkyňova 10, 747 43 Opava

Mák setý (*Papaver somniferum* L.) je plodina, ktorá nachází své uplatnění zejména v potravinářském a farmaceutickém průmyslu. V ČR se pěstuje výhradně mák setý semenného

(olejného) typu a v současnosti patří ČR společně s Tureckem k nejvýznamnějším evropským pěstitelům máku setého[1-3]. Cílem práce bylo vyvinutí a zavedení metodiky pro extrakci alkaloidů z makoviny máku setého a jejich stanovení pomocí vysokoúčinné kapalinové chromatografie s UV/VIS detekcí. Byl navržen optimální postup pro přípravu vzorků zahrnující extrakci na pevné fázi. K výhodám metody patří zejména jednoduchá izolace alkaloidů z makoviny, relativně krátký čas analýzy a stanovení nejvýznamnějších alkaloidů v máku setém. Byly navrženy a validovány optimální chromatografické podmínky a postup pro přípravu vzorků zahrnující extrakci na pevné fázi. V rámci testovaných validačních parametrů byla pro stanovení obsahu morfinu ověřena opakovatelnost, správnost, linearita, citlivost, mez detekce, mez stanovitelnosti a robustnost. Nalezené limity detekce a kvantifikace jsou srovnatelné s údaji v literatuře[3]. Metoda byla aplikována na reálné vzorky makoviny ze sklizně roku 2013. Výsledky validace prokázaly, že lze metodu využít jako rutinní, rychlou, spolehlivou a přesnou pro stanovení alkaloidu morfinu ve vzorcích makoviny při šlechtění máku setého.



Obr. 1. Chromatogram vzorku makoviny. Kolona Ascentis Express F5, MF A: 5% acetonitril, MF B: acetonitril : ledová octová kyselina : triethylamin = 97,9 : 2 : 0,1, 1 ml.min⁻¹, UV/VIS detekce, 284 nm.

- [1] Schulzová V., Hajšlová J.: *Toxické alkaloidy v potravním řetězci člověka*. Vědecký výbor fytosanitární a životního prostředí. Veřejný dokument. Praha 2007.
[2] Singh D. V., Prajapati S., Bajpai S., Verma R. K., Gupta M. M., Kumar S.: *J. Liq. Chrom. Rel. Technol.* 23, 1757 (2000).
[3] Kabátová N., Šulová R.: *Bulletin Národní referenční laboratoře XVII* 2013/1. Ústřední kontrolní a zkušební ústav zemědělský, Brno 2013.

1Po11**INFLUENCE OF FREEZE-DRYING ON THE NATIVE HYALURONAN REACTIVITY STUDIED BY FLUORESCENCE TECHNIQUES**Petra Michalicová¹, Miloslav Pekař¹, Filip Mravec¹¹ Centre for Material Research, Faculty of Chemistry, Brno University of Technology, Purkynova 118, 612 00 Brno, Czech Republic, xcmichalicovap@fch.vutbr.cz

Freeze-drying method enables a friendly way to remove the solvent and improve the stability of the products. This method is widely used in pharmaceutical and biotechnological industry. Systems with viruses, vaccines, proteins or colloidal particles are often freeze-dried during their development. The basic principle of freeze-drying is the sublimation of solvent from frozen sample at very low pressure and laboratory ambient temperature.

In our work we used freeze-drying for treating of native unmodified hyaluronan. This biopolymer is widely used in medical and cosmetic field, because its properties perfectly fulfil the demanding requirements in these areas. In many cases its high solubility in water solution and strong hydrophilic character is utilized. Due to this property hyaluronan chain is surrounded by layer formed by organized molecules of water. Contrary to this, hyaluronan chain contains also hydrophobic areas which can provide binding sites for hydrophobic chemicals (such as drugs or vitamins). Unfortunately the aqueous layer around the polymer chain does not allow access to the binding sites for hydrophobes.

The logic and easiest way to solve this problem can be obtained by drying of the sample. However hyaluronan is degrading even at slightly elevated temperature. That is what freeze-drying method can solve. For purposes of this work, fluorescence probes were used as indicators of the interactions. Fluorescence parameters specific for individual probes confirmed the efficiency of the freeze-drying method.

This work was supported by project Nr. LO1211, Materials Research Centre at FCH BUT-Sustainability and Development (National Programme for Sustainability I, Ministry of Education, Youth and Sports).

1Po12**SNÍŽENÍ RADIAČNÍ CITLIVOSTI MIKROORGANISMŮ POMOCÍ VYCHYTÁVAČŮ OH RADIKÁLŮ PŘI RŮZNÝCH DÁVKOVÝCH RYCHLOSTECH ZÁŘENÍ GAMA**

Barbora Neužilová a Viliam Múčka

ČVUT v Praze, FJFI, Břehová 7, 115 19 Praha 1, b.neuzilova@gmail.com

Studiu vlivu ionizujícího záření na živé buňky je přikládána velká pozornost. Z řady prací vyplývá, že jedním z nejdůležitějších parametrů ovlivňujících radiační citlivost buněk je dávkový příkon aplikovaného záření [1, 2]. To zřejmě souvisí se skutečností, že s rostoucí dávkovou rychlostí roste hustota ionizovaných a excitovaných stavů v ozařovaném prostředí. Výsledky tohoto studia mohou být prospěšné například v lékařství, kde při radioléčbě karcinomů je nutné zabezpečit, aby došlo k co nejmenšímu poškození zdravé tkáně.

Cílem naší práce bylo studovat závislost míry snížení radiační citlivosti kvasinek *Saccharomyces cerevisiae* vychytáváním hydroxylových radikálů na dávkové rychlosti záření gama. Jako vychytávače OH radikálů byl použit methanol nebo ethanol. Ozařování bylo prováděno radionuklidem ⁶⁰Co umístěným v komerčním zdroji Gammacell 220. Dávkové rychlosti byly 18; 28; 35 a 42 Gy/hod. Míra radiační citlivosti *k* byla definována jako směrnice závislosti podílu přirozených logaritmu frakcí přeživších buněk bez vychytávače a s vychytávačem na vychytávací účinnosti daného vychytávače.

Bylo zjištěno, že průběh závislosti veličiny *k* na dávkovém příkonu je podobný pro oba studované vychytávače (monotónní růst radiační citlivosti buněk s rostoucí dávkovou rychlostí asi do 40 Gy/h), což pravděpodobně může souviset s jejich podobným charakterem (jednoduché alkoholy). Orientační experimenty naznačují, že u obou alkoholů může být tato závislost nelineární s maximem při dávkové rychlosti větší než je výše uvedená hodnota.

Tato práce byla podpořena grantem Studentské grantové soutěže ČVUT č. SGS 14/207/OHK4/3T/14.

LITERATURA

- [1] MÚČKA, V.; BLÁHA, P.; ČUBA, V. Measurement of growth and survival curves of microorganisms influenced by radiation. Journal of radioanalytical and nuclear chemistry, vol. 286, 2010, str. 603-610.

- [2] PETIN, V. G.; ZHURAKOVSKAYA, G. P. *The Peculiarities of the Interaction of Radiation and Hypertermia in Saccharomyces cerevisiae Irradiated with various Dose Rates*. Yeast, Vol. 11, 1995, str. 549-554.

1Po13

ÚČINNÉ PRIEREZY DVOJFOTÓNOVEJ ABSORPCIE PERSPEKTÍVNYCH ZLÚČENÍN NA BÁZE DERIVÁTOV BENZOTIAZOLU

¹Eva Noskovičová, ¹Dušan Lorenc, ²Ivica Sigmundová, ¹Peter Magdolen, ¹Pavol Záhradník, ^{1,2}Dušan Velič

¹Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského, Ilkovičova 6, 84215, Bratislava, noskoviov.nereyn.eva1@gmail.com

²Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 84104, Bratislava

Účinný prierez dvojfotónovej absorpcie bol stanovený fluorescenčne aktívnym derivátom benzotiazolu. Pritom bola použitá nepriama metóda, ktorá využíva fluorescenčné vlastnosti zlúčenín spôsobené absorpciou dvoch fotónov v rámci jedného elektrónového prechodu a laserové žiarenie vysokých výkonov (intenzita elektrického poľa rádovo $10^{11} - 10^{12}$ V/m). Ako zdroj laserového žiarenia bol použitý titán zařírový femtosekundový laserový systém s výstupnou vlnovou dĺžkou 800 nm a časovou dĺžkou impulzov 100 fs a následne preladiteľný optický parametrický zosilňovač pracujúci v rozsahu vlnových dĺžok od 700 nm do 950 nm s časovou dĺžkou impulzu 150 fs. V tomto spektrálnom rozsahu nadobúdali merané účinné prierezy dvojfotónovej absorpcie hodnoty od 150 GM do 4000 GM ($1\text{GM} = 1 \times 10^{-50} \text{ cm}^4 \text{ foton}^{-1}$). Zlúčeniny s vysokými hodnotami účinných prierezov dvojfotónovej absorpcie a s dobrou kvantovou účinnosťou majú perspektívu pre uplatnenie v nelineárnej optike a vo fluorescenčnej mikroskopii.

Táto práca vznikla za podpory grantovej agentúry VEGA, grant No. 1/0943/11. Ďalej bolo možné experiment uskutočniť vďaka Medzinárodnému laserovému centru, ktoré poskytlo prístroje na meranie.

- [1] Ch. Xu, W.W. Webb, Measurement of two-photon excitation cross section of molecular fluorophores with date from 690 to 1050 nm. J. Opt. Soc. Am. 1996, 481-491
- [2] P. Hrobárik, V. Hrobáriková, I. Sigmundová, P. Záhradník, M. Fakis, I. Polyzos, P. Persephonis, Benzotiazoles with Tunable Electron-Withdrawing Strength and Reverse Polarity: A Route to

Triphenylamine- Based Chromophores with Enhanced Two-Photon Absorption. J. Org. Chem. 2011, 79, 8726-87360

- [3] L. S. Chang, R. B. Cho, Two-photon probes for biomedical applications. BMB Rep. 2013; 46(4): 188-194. doi: 10.5483/BMBRep.2013.46.4.045

1Po14

STUDY OF ELECTROCHEMICAL BEHAVIOR OF DASATINIB USING HANGING MERCURY DROP ELECTRODE AND GOLD DISC ELECTRODE

Kateřina Nováková^{1,2}, Tomáš Navrátil¹, Jana Jaklová Dytrtová³, Michal Jakl⁴

¹J. Heyrovsky Institute of Physical Chemistry of the AS CR, v.v.i., Dolejškova 3, 182 23 Prague 8, Czech Republic, katerina.novakova@jh-inst.cas.cz

²University of Pardubice, Faculty of Chemical Technology, Institute of Environmental and Chemical Engineering, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Czech Republic

³Institute of Organic Chemistry and Biochemistry of the AS CR, v.v.i., Flemingovo náměstí 2, 166 10 Prague 6, Czech Republic

⁴Department of Agro-Environmental Chemistry and Plant Nutrition, Faculty of Agrobiological Sciences, food and Natural Resources, Czech University of Life Sciences Prague, Kamýcká 129, 165 21 Prague 6, Czech Republic

Dasatinib is a type of drug called a protein tyrosine kinase inhibitor. It is used for treatment of chronic myeloid leukaemia (cancer of granulocytes which start growing out of control), Philadelphia chromosome positive (Ph⁺) acute lymphoblastic and myeloid leukaemia (lymphocytes multiply too quickly and live too long). Dasatinib inhibits the growth of these leukaemic cells by blocking the signals that tell the cells to grow [1-3].

The voltammetric behavior of dasatinib was studied by differential pulse voltammetry (DPV) and by cyclic voltammetry (CV). The hanging mercury drop electrode (HMDE) with the mercury drop surface $0.721 \pm 0.022 \text{ mm}^2$ ($\alpha < 0.05$) and with the capillary inner diameter about 55 μm and the gold disc electrode with inner diameter 1 mm were used as the working electrodes. The optimum conditions for DPV determination of dasatinib were found in Britton-Robinson buffer. The reaction mechanism was investigated using CV and elimination voltammetry with linear scan (EVLS). DPV with optimized parameters was used for determination of dasatinib in analyzed solutions.

The research was supported by GACR (13-21409P, P208/12/1645, by Ministry of Education Youth and Sports (S grant), and by University of Pardubice (project No. SGSFChT_2015006).

- [1.] Deng Q. W., Mitsiades N., Negri J., Wen Z. Q., Rooney M., Hideshima T., Chauhan D., Munshi N. C., Richardson P. G., Lee F. Y., Anderson K. C., Mitsiades C. S.: *Blood* 106, 451a (2005).
- [2.] Lindauer M., Hochhaus A.: *Small Molecules in Oncology*, 2nd Edition 201, 27 (2014).
- [3.] Jaklova Dytřtova J., Jakl M., Navrátil T.: XXXV. Moderní Elektrochemické Metody (Modern Electrochemical Methods XXXV): Detection of Dasatinib using Pre-reaction with Copper and Mass Spectrometry, (Navrátil T., Fojta M., Schwarzova K., Eds.), Best servis Ústí nad Labem, Jetřichovice, Czech Republic 2015, p. 76.

1Po15

DETERMINATION OF REBAUDIOSIDE A AND STEVIOSIDE IN FOOD SUPPLEMENTS AND BEVERAGES BY CAPILLARY ELECTROPHORESIS WITH CONTACTLESS CONDUCTIVITY DETECTION

Václav Pavlíček¹, Petr Tůma¹ and Eva Samcová¹

¹*Institute of Biochemistry, Cell and Molecular Biology, Third Faculty of Medicine, Charles University in Prague, Ruská 87, 100 00 Prague 10, Czech Republic, e-mail address: vaclav.pavlicek@lf3.cuni.cz*

The plant *Stevia rebaudiana* Bertoni has been widely cultivated in the world for the sweet diterpene glycosides. The leaves contain different diterpene glycosides arising from the same aglycone, steviol. There are eleven steviol glycosides with stevioside being the most abundant (about 300 times sweeter than saccharose), followed by rebaudioside A which is known to be even sweeter. Steviol-glycoside sweeteners are commonly used as nonnutritive and high-intensity sweeteners in food supplements and beverages. The electrophoretic separations were performed by means of the HP^{3D} CE system with contactless conductivity detection. The fused-silica capillary was 33 cm long (18 cm to the contactless conductivity detector) with 10 μ m internal diameter. The optimized background electrolyte was 100 mM boric acid/LiOH, pH 8.97, containing 2% v/v polyethylene glycol (8000). Separations were performed by applying high voltage of + 20 kV and samples were injected into the capillary by pressure 50 mbar for 100 s. Samples were directly dissolved in water and diluted with acetonitrile.

The migration times of the tested steviol glycosides had values 4.86 min for rebaudioside A and 4.93 min for stevioside, respectively. The resolution of both peaks was 1.32. The attained separation efficiency was between 312 000 – 463 000 plates/m.

Acknowledgements

Financial support from the Grant Agency of Charles University in Prague, Grant No. 1386214, and Grant Agency of the Czech Republic, Grant No. 15-03139S, is gratefully acknowledged.

1Po16

DUÁLNÍ CHEMOSENZOR PRO STANOVENÍ BIOLOGICKÝ VÝZNAMNÝCH MOLEKUL

Blanka Pelikánová¹, Michal Šídlo¹, Marek Pernica¹, Přemysl Lubal^{1,2}

¹*Ústav chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Kotlářská 2, CZ- 611 37 Brno*

²*Středoevropský technologický institut (CEITEC), Masarykova univerzita, Kamenice 5, CZ-625 00 Brno e-mail: 350431@mail.muni.cz*

Jedním z moderních trendů analytické chemie je vývoj nových optických chemosenzorů založených na reakci mezi komplexem iont kovů-azobarvivo a analytem, kdy analyt tvoří s iontem kovu termodynamicky stabilnější komplex s rozdílnými spektrálními vlastnostmi, čehož se dá využít k jeho kvalitativní i kvantitativní analýze. [1]

Tento příspěvek se zabývá studiem komplexů iontů kovu (Zn, Cu, Cd) s vybranými azobarvivy jako ligandy, která jsou vhodná analytická činidla pro kvantitativní stanovení sloučenin obsahujících síru (cystein, glutation) nebo sloučenin obsahujících fosfor (fosforečnan, ATP, AMP) pomocí molekulové absorpční a luminiscenční spektroskopie.

- [1] Kitamura M., Shabbir S. H., Anslyn E. V.; Guidelines for Pattern Recognition Using Differential Receptors and Indicator Displacement Assays; *J. Org. Chem.* (2009)

1Po17**DEGRADÁCIA CHOLESTEROLU NA FOTOKATALYZÁTORE – OXIDE TITANIČITOM**Michal Procházka¹, Dušan Velič^{1,2}¹*Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského v Bratislave, Ilkovičova 6, 84215 Mlynská dolina, prochazkam@fns.uniba.sk*²*Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 81219 Bratislava*

Nanokryštalický oxid titaničitý (nc-TiO₂) je polovodičový fotokatalyzátor. Vplyvom UV žiarenia vznikajú na povrchu nc-TiO₂ radikály, ktoré môžu následne rozkladať iné látky nachádzajúce sa na povrchu. Aby tento proces prebiehal efektívne, musí na povrch nc-TiO₂ dopadať UV svetlo s dostatočnou intenzitou a vhodnou vlnovou dĺžkou [1]. Cieľom tejto práce bolo pripraviť tenké filmy nc-TiO₂ a sledovať degradáciu cholesterolu na povrchu nc-TiO₂. Tenké filmy nc-TiO₂ boli pripravené sedimentáciou nanoprášku na sklený substrát [2]. Na pripravený film nc-TiO₂ bola následne nakvapkaná vrstva chloroformového roztoku cholesterolu. V práci boli vzorky analyzované hmotnostnou spektrometriou sekundárnych iónov (SIMS) po ožarovaní UV LED diódou s vlnovou dĺžkou 365 nm každých 15 minút po dobu 1 hodiny.

V hmotnostných spektrách boli sledované intenzity píkov zodpovedajúcim fragmentom cholesterolu [M–OH]⁺, [M–H]⁺ a [M+CH₃]⁺, v závislosti od dĺžky ožarovania vzoriek UV svetlom. Pri fragmentoch [M–OH]⁺, [M–H]⁺ bol sledovaný pokles o približne 40% za jednu hodinu. Pri fragmente [M+CH₃]⁺ možno najprv sledovať nárast intenzity a potom malý pokles.

Z nameraných dát možno usudzovať, že na povrchu skla s tenkou vrstvou fotokatalyzátora nc-TiO₂ dochádza pri ožarovaní UV svetlom k degradácii cholesterolu, pri ktorej vzniká väčšie množstvo nízkych organických fragmentov. Ich naviazanie na molekulu cholesterolu zapríčiňuje zvýšenie intenzity väčšieho fragmentu [M+CH₃]⁺, ktorý sa však pri dlhšej dobe ožarovania taktiež rozkladá.

Táto práca vznikla za podpory grantov ERDF OP R&D, Project 'meta-QUTE- Centrum excelentnosti kvantových technológií', APVV-0491-07 a UK/66/2012..

[1] FUJISHIMA, A. – HASHIMOTO, K. – WATANABE, T. 1999. TiO₂. Photocatalysis, Fundamentals and Applications, BKC, Inc., 1999, ISBN 4-969051-03-X.

[2] PROCHÁZKA, M. 2011. Hmotnostná spektrometria rozkladu cholesterolu na povrchu fotokatalyzátora TiO₂: diplomová práca. Bratislava : PriFUK, 2011. 61 s.

1Po18**VÝVOJ RÝCHLYCH ANALYTICKÝCH METÓD NA STANOVENIE MEDI U PACIENTOV TRPIACICH WILSONOVOU CHOROBOU**Simona PROCHÁZKOVÁ¹, Peter BOŽEK¹ a Radoslav HALKO¹¹*Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra analytickej chémie, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovenská republika, curmova@fns.uniba.sk*

Náš organizmus využíva len niekoľko tisícín resp. miliónin gramov biologicky významných prvkov, avšak ich prítomnosť v organizme je pre udržanie zdravia nevyhnutná. V posledných niekoľkých desiatok rokoch sa všeobecne zvyšuje záujem o stanovenie týchto prvkov na stopových alebo ultrastopových koncentračných úrovniach v rôznych biologických matriciach. Med' je príkladom kovu, ktorý je pre človeka esenciálny, ale v nadbytku je pre organizmus toxický. Je nevyhnutná pre správnu funkciu každej bunky ľudského organizmu. V organizme je tento prvok viazaný pomocou bielkoviny ceruloplazmínu, pretože voľná med' je toxická [1]. Geneticky podmienený nedostatok ceruloplazmínu vedie k zvýšeným koncentráciám voľnej medi tzv. Wilsonovej chorobe. Príčinou Wilsonovej choroby je znížená transcelulárna transportná funkcia P-typu ATP-ázy viažuca med'. V laboratórnom obraze u cca 60% pacientov dominuje znížená koncentrácia transportnej bielkoviny pre med'-ceruloplazmínu (normálna hladina ceruloplazmínu však nevyklučuje diagnózu). Základné vyšetrenie na určenie množstva medi v organizme sa vykonáva meraním obsahu ceruloplazmínu v krvi, to však nie je dostatočné. Voľná, na ceruloplazmín neviazaná med' vyvoláva zvýšené vylučovanie medi močom. Priame stanovenie obsahu medi v ľudskom moči predstavuje lepšiu alternatívu, pretože za 24 hodín sa močom vylúči okolo 1,5 μmol medi. Obsah medi v moči nakazených Wilsonovou chorobou je niekoľkonásobne vyšší a to až na úrovni okolo 5–10 μmol za 24 hodín [2]. Práca sa zaoberá stanovením medi v ľudskom moči u zdravých jedincov a u pacientov trpiacich Wilsonovou chorobou s použitím 1. extrakcie s využitím teploty zákalu micelárnych roztokov

(CPE) kombinovanou s atómovou absorpčnou spektrometriou (FAAS) a reverzne-fázovej kvapalinovej chromatografie so spektrofotometrickou detekciou vo viditeľnej oblasti spektra (RP-LC/VIS).

Táto práca vznikla za finančnej podpory grantovej agentúry MŠ SR VEGA, grant č. 1/0852/13, Grantu UK č. UK/101/2015 a Agentúry na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APVV-0583-11 pod záštitou centra excelencie VVCE-0070-07.

- [1] E. Vuori, A. Huunan-Seppala, J.O. Kilpio, *Scand. J. Work Environ. Health*, 1978, **4**, 167–175
 [2] J. F. Wilson, W. H. Klassen, *Clin. Chim. Acta*, 1966, **13**, 766–774.

1Po19

DETERMINATION OF SELENIUM BY UV-PHOTOCHEMICAL VAPOUR GENERATION COUPLED WITH GRAPHITE FURNACE ATOMIC ABSORPTION SPECTROMETRY

Marcela Rybínová¹, Václav Červený¹, Petr Rychlovský¹

¹Charles University in Prague, Faculty of Science, Department of Analytical Chemistry, Hlavova 2030/8, 128 43 Prague, Czech Republic, rybinova@natur.cuni.cz

A sensitive, relatively inexpensive and environmentally friendly method has been developed for the determination of selenium (Se(IV)) in the sub-ppb range. UV-photochemical vapour generation (UV-PVG) in combination with *in-situ* trapping and atomization of the generated volatile compounds in the graphite furnace atomizer of atomic absorption spectrometer (GF-AAS) was used for this purpose.

During UV-PVG, the conversion of nonvolatile precursors from the condensed phase to the volatile species occurs under the action of UV irradiation. The assistance of low molecular weight organic acids is also a crucial requirement for this approach to generation [1]; formic acid was chosen in the study.

Optimum experimental conditions for generation, collection and atomization of volatile compounds were found and the analytical characteristics of the method were subsequently determined. A very low concentration detection limit of 5.7 ng L⁻¹ Se(IV) (corresponding to an absolute LOD 26 pg) was achieved. The repeatability expressed as RSD was 3.2% at 0.5 µg L⁻¹ Se(IV). Analysis of the certified reference material NIST SRM 1643e

was performed to demonstrate the accuracy of the proposed method with good agreement between the certified and experimentally achieved value. The effect of various concomitants on the selenium analytical signal was also studied as well as an overall efficiency of UV-PVG/GF-AAS.

This work was financially supported by the Charles University in Prague: GAUK 228214, project UNCE 204025/2012 and project SVV 260205.

- [1] Xuming Guo, Ralph E. Sturgeon, Zoltán Mester and Graeme J. Gardner: *Analytical Chemistry*, 75, 2092–2099 (2003).

1Po20

INTERAKCE AROMATICKÝCH SLOUČENIN SE ZLATÝMI NANOČÁSTICEMI MODIFIKOVANÝMI CYKLODEXTRINÝ

Helena Sedláčková^{1*}, Jakub Koktan^{1,2}, Klára Řezanková¹, Michal Řezanka³ a Pavel Řezanka¹

¹Ústav analytické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6.

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

³Ústav pro nanomateriály, pokročilé technologie a inovace, Technická Univerzita v Liberci, Studentská 1402/2, 461 17 Liberec 1.

*helena.sedlackova@vscht.cz

Stav a kvalita životního prostředí jsou v současnosti pečlivě zkoumány a posuzovány. Velkým problémem může být především přítomnost hnojiv, pesticidů či odpadních látek z chemických procesů [1]. Součástí odpadních látek jsou i aromatické sloučeniny, pro jejichž detekci jsou tradičně využívány chromatografické metody nebo hmotnostní spektrometrie. Zajímavou alternativu nabízí rozvoj nanotechnologií a jejich inovace, konkrétně kolorimetrická detekce pomocí nanočástic zlata (AuNP). Nespornou výhodou této techniky je její rychlost a jednoduché provedení, které nevyžaduje složitou aparaturu [2].

Pro detekci aromatických uhlovodíkových sloučenin je nezbytná modifikace povrchu nanočástic vhodnými molekulami. Takovými činidly mohou být cyclodextriny [3], především β-cyclodextrin (β-CD), makrocyclická sloučenina ve tvaru dutého komolého kuželu, jejíž lipofilní kavita je ideální pro interakci s analytem na principu hostitel-host. Tato práce si klade za cíl prezentovat přípravu těchto systémů a studium

jejich interakcií s modelovými aromatickými analyty.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č.20/2015).

- [1] Thatai S., Khurana P., Boken J., Prasad S., Kumar D.: *Microchem. J.* 116, 62 (2014).
- [2] Wang J., Lu J., Su S., Gao J., Huang Q., Wang L., Huang W., Zuo X.: *Biosens. Bioelectron.* 65, 171 (2015).
- [3] Montes-Garcia V., Perez-Juste J., Pastoriza-Santos I., Liz-Marzan L. M.: *Chem. Eur. J.* 20, 10874 (2014).

1Po21

FORENZNÉ VYUŽITIE MATRICOVÉHO EFEKTU V HMOTNOSTNEJ SPEKTROMETRII SEKUNDÁRNYCH IÓNOV PRI ŠTÚDIU POVÝSTRELOVÝCH SPLODÍN A MODELOVÉHO SYSTÉMU OLOVNATÉ SOLI/FULLERÉNY

Lenka Slušná¹, Soňa Halászová¹, Michal Procházka¹, Dušan Velič^{1,2}

¹Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, slusnal@gmail.com

²Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 842 15 Bratislava

Súčasťou forenznej vedy je vývoj nových metód analýzy dôkazov z miesta činu. Jednou z týchto metód je aj hmotnostná spektrometria sekundárnych iónov (SIMS), ktorá pre svoju vysokú citlivosť môže byť považovaná za potenciálne perspektívnu techniku na analýzu povýstrelových splodín [1]. Pretože intenzita sekundárnych iónov je významne ovplyvnená matricovým efektom, čo je silná závislosť výťažku sekundárnych iónov od samotnej matrice vzorky, citlivosť tejto metódy môžeme ešte zvýšiť voľbou vhodnej matrice. Na analýzu sme využili fullerény C₆₀. Pre ich sférický tvar je možné využiť ich ako matricu, pretože pozitívne podporujú kolízny mechanizmus, a tým môžu zvýšiť výťažok analýzy [2]. Tieto matrice sme testovali na malých molekulách. Zaoberali sme sa analýzou povýstrelových splodín a modelového systému olovnaté soli/fullerény.

Vytvorili sme závislosti intenzity sekundárnych iónov ²⁰⁶Pb, ²⁰⁷Pb, ²⁰⁸Pb, ²⁰⁶PbOH, ²⁰⁷PbOH, ²⁰⁸PbOH, PbNO, PbNO₂, PbNO₃ od počtu vrstiev fullerénovej matrice. Najvyššiu výťažnosť (zhruba 2-3 násobné zvýšenie intenzity) sme dosiahli pri 40 vrstvách, kde sme vytvorili kompaktnú súvislú vrstvu fullerénov s pomerne rovnomernou distribúciou a veľkosťou častíc, čo

sme si potvrdili pomocou atómovej silovej mikroskopie. Uvedené sú topografie a morfológie povrchov fullerénových matric zobrazené atómovou silovou mikroskopiou, pretože práve tie ovplyvňujú prenos energie k povrchu vzorky a tvorbu sekundárnych iónov.

- [1] Benninghoven, A. (1973) *Surface Science*, 35, pages 427-457
- [2] Stupavská M., Velič D., et al. (2011) *J. of the A. Society for Mass Spectrometry*, 22, pages 2179-2187

1Po22

BROADBAND THZ SPECTROSCOPY OF CYCLIC OLEFIN COPOLYMER MATERIALS FOR NONLINEAR THZ WAVEMIXING

Lenka Slušná¹, Eva Noskovičová¹, Dušan Lorenc², Eduard Jáně¹, Vojtech Szocs¹ and Dušan Velič^{1,2}

¹Faculty of Natural Sciences, Ilkovičova 6, Mlynská dolina, 84215, Bratislava slusnal@gmail.com

²International Laser Centre, Ilkovičova 3, 841 04, Bratislava

A broadband two-color plasma based THz spectrometer [1] was recently developed and implemented within the Laboratory of Ultrafast Laser Photonics. The unique scientific instrument is currently covering spectral range of 0 to 6 THz and is characterized by unparalleled performance in terms of achievable field strengths.

A range of COC based materials including ZEONEX and TOPAS has been evaluated by means of Terahertz Time-Domain Spectroscopy (THz-TDS) and their properties were compared to reference samples. Both the dispersion properties and absorption characteristics were targeted. It was confirmed that the COC based materials show excellent optical properties in the THz range and are promising candidates for applications requiring high transparency and refractive index tuning.

This research is sponsored by NATO's Emerging Security Challenges Division in the framework of the Science for Peace and Security Programme.

- [1] M. D. Thomson et. al., *Laser&Photon. Rev.* 1, 349 (2007).

1Po23**AUTOMATED ON-LINE MONITORING OF LONG-TERM PROCESSES USING SEQUENTIAL INJECTION ANALYSIS**

Petr Solich, Hana Sklenářová

Department of Analytical Chemistry, Faculty of Pharmacy, Charles University, Hradec Kralove, Czech Republic solich@faf.cuni.cz

Sequential injection analysis (SIA), as other flow techniques, enables precise manipulation with aspirated samples with respect to sample pre-treatment, chemical reaction, simple separation but also can help to on-line monitor long term processes such as dissolution or liberation studies and also monitoring drug interactions with cell membrane transporters etc. The main reason why flow techniques are applied in this field of scope is based on the real-time measurement, detailed kinetic profile obtained and no need to manipulate or store samples before off-line determination of analytes of interest. Kinetic profiles bring more valuable and complete information about the monitored processes compared to common off-line measurements where only a few (mainly 3) points are obtained.

The other advantage of automated monitoring is based on connection of higher number of monitored units to one flow system – commonly 3 or 6 units can be monitored at the same time using delayed sampling from the respective unit. Cleaning of filters used in sampling tube or refilling the medium volume is also easy to be carried out in the flow systems. Chemical reaction or separation of more analytes could be managed in the same flow system to determine all analyzed substances.

References:

- [1] Solich P., Sklenářová H., Huclová J., Šatínský D., Schaefer U., *Anal. Chim. Acta* 499 (2003) 9.
- [2] Klimundová J., Sklenářová H., Schaefer U., Solich P., *J. Pharm. Biomed. Anal.* 37 (2005) 893.
- [3] Klimundová J., Šatínský D., Sklenářová H., Solich P., *Talanta* 69 (2006) 730.

Acknowledgements:

The work is co-financed by the Grant Agency of Czech Republic – project No. 15-107815.

1Po24**NEW INSIGHT INTO MIXED LIPOSOMAL SYSTEM**Jana Szewieczková¹, Irena Türkeová¹, Filip Mravec¹, Miloslav Pekař¹

¹Materials Research Centre, Faculty of Chemistry, Brno University of Technology, Purkynova 118, 612 00 Brno, Czech Republic, xcszewieczkovaj@fch.vutbr.cz

This work is based on studying of an aggregation behaviour of mixed liposomes composed of a cationic lipid and phospholipid in the presence of biodegradable, biocompatible polymer with and without a modification. This mixed system of lipids with different charge of polar headgroup provides new structures with improved mechanical stability [1]. As a suitable polymer was chosen linear polysaccharide composed of alternating disaccharide units of *D*-glucuronic acid and *N*-acetyl-*D*-glucosamine with inter glycosidic linkage [2].

System solubilizing both hydrophilic and hydrophobic materials could be synthesised in this way and which will be useful in the targeted delivery of drugs or in cosmetics.

The aggregation behaviour of mixed lipid system was studied using fluorescence spectroscopy utilizing pyrene as a fluorescence probe. Pyrene is widely used for this purpose due to its sensitivity to the surrounding environment polarity (pyrene 1:3 ratio method) [3]. These experiments were performed with different cationic lipid/phospholipid molar and different biopolymers.

Our results suggest strong interactions between chosen polymers and mixed liposomal system.

This work was supported by project Nr. LO1211, Materials Research Centre at FCH BUT-Sustainability and Development (National Programme for Sustainability I, Ministry of Education, Youth and Sports).

- [1] AL Troutier, L Veron, T Delair, C Pichot, C Ladaviere: *Langmuir*, (2005)
- [2] YJ Jin, T Ubonvan, DD Kim: *J Pharm Inv*, (2010)
- [3] J Aguiar, P Carpena, JA Molina-Bolivar, C Carnero Ruiz: *J Col Int Sci*, (2003)

1Po25**OPTIMALIZACE METODY STANOVENÍ AKTIVITY PANKREATICKÉ LIPÁZY**Šárka Štěpánková¹, Katarína Vorčáková¹¹*Katedra biologických a biochemických věd, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, sarka.stepankova@upce.cz*

Lipázy (triacylglycerol acylhydrolázy, EC 3.1.1.3.) jsou skupinou ve vodě rozpustných enzymů, které vykazují schopnost působit na rozhraní mezi vodnou a organickou fází. Jsou definovány jako hydrolázy, které katalyzují štěpení triacylglycerolů na diacylglyceroly s následným vznikem monoacylglycerolů a mastných kyselin. Nadměrná produkce pankreatické lipázy indikuje přítomnost některých onemocnění. Společně s α -amylázou je pankreatická lipáza již řadu let nejdůležitějším biochemickým parametrem v diferenciální diagnostice onemocnění pankreatu.

Pro stanovení katalytické aktivity pankreatické lipázy byla využita spektrofotometrická metoda s *p*-nitrofenylpalmitátem jako substrátem. Princip tohoto stanovení spočívá ve schopnosti lipolytických enzymů štěpit *p*-nitrofenylpalmitát na kyselinu palmitovou a žlutě zbarvený produkt *p*-nitrofenol, který je stanoven spektrofotometricky při 410 nm. Aktivitu lipázy je možné následně stanovit pomocí kalibrační přímky pro *p*-nitrofenol a vyjádřit ji jako množství *p*-nitrofenolu, které se uvolnilo z *p*-nitrofenylpalmitátu působením enzymu [1].

Cílem této práce bylo sledovat vliv koncentrace substrátu (0,12-0,21 mmol/l v reakční směsi), teploty (22-52 °C a pH (7,4-8,8) na aktivitu pankreatické lipázy a určit podmínky, za kterých je aktivita lipázy nejvyšší.

[1] Pinsirodom P., Parkin K.L. (2001) Lipase Assays *Curr. Protoc. Food Analyt. Chem.* C3.1.1-C3.1.13

1Po26**LASER DESORPTION IONISATION TIME-OF-FLIGHT MASS SPECTROMETRY (LDI TOFMS) OF CHALCOGENIDE GLASSES FROM PSEUDO-BINARY (GeSe₂)_{100-x}(Sb₂Se₃)_x SYSTEM**Katarína Šútorová¹, Lubomír Prokeš^{1,2,3}, Virginie Nazabal^{4,5}, Marek Bouška⁴, Petr Němec⁴, and Josef Havel^{1,2,3}¹ *Department of Chemistry, Faculty of Science, Masaryk University, Kamenice 5/A14, 62500 Brno, Czech Republic, svihlova@chemi.muni.cz*² *Department of Physical Electronics, Faculty of Science, Masaryk University, Kotlářská 2, 61137 Brno, Czech Republic*³ *CEPLANT, R&D Centre for Low-Cost Plasma and Nanotechnology Surface Modifications, Masaryk University, Kotlářská 2, 61137 Brno, Czech Republic*⁴ *Department of Graphic Arts and Photophysics, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentská 573, 53210 Pardubice, Czech Republic*⁵ *ISCR, Glasses and Ceramics team, UMR/CNRS 6226, University of Rennes 1, 35042 Rennes, France*

It has already been shown that LDI TOFMS is a powerful and useful technique to generate and study clusters of various solid materials including chalcogenide glasses[1], which are known due to their high (non)linear refractive indices, broad transmission window in IR spectral region, and photosensitivity to light exposure.[2] This advance material has broad applications in the fields such as infrared optics, electronics, micro-electronics, telecommunication systems and medicine.

Mass spectra generated from (GeSe₂)_{100-x}(Sb₂Se₃)_x glasses' powder samples are quite complex with several clusters overlap. Stoichiometry of clusters detected in plasma was determined via comparison of experimental isotopic envelopes with theoretical models.[3]

In positive ion mode, Sb⁺, Se₂⁺, Sb₃⁺, GeSe_c⁺, (*c* = 1-2), SbSe_c⁺ (*c* = 1-2), Sb₂Se_c⁺ (*c* = 1-4), Ge_aSb₃⁺, Sb₃Se_c⁺ (*a* = 1-4, *c* = 1-4), Sb₃Se₅⁺, GeSb_bSe⁺ (*b* = 4-5), GeSbSe₂⁺, and Ge₉Sb₂Se_c⁺ (*c* = 5-7) entities were detected. In negative ion mode, Se_c⁻ (*c* = 2-3), SbSe_c⁻ (*c* = 1-3), Sb₂Se_c⁻ (*c* = 3-4), and GeSbSe_c⁻ (*c* = 3-5) entities were identified. Some of clusters such as GeSe_c⁺ (*c* = 1-2), SbSe₃⁻, Sb₂Se_c⁺ (*c* = 1-4), and Sb₂Se_c⁻ (*c* = 3-4) identified by LDI TOFMS, could be considered to be structural fragments of the glasses' original structure. This was also proved by Raman spectroscopy.[3]

The Czech Science Foundation (Projec No. 13-05082S) and the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (Project CZ.1.07/2.3.00/30.0058) financially supported this work. This research has been also supported by CEPLANT, the project R&D center for low-cost plasma and nanotechnology surface modifications CZ.1.05/2.1.00/03.0086 funding by European Regional Development Fund.

- [1] K. Sutorova, P. Hawlova, L. Prokes, P. Nemec, R. Boidin, J. Havel. *Rapid Communications in Mass Spectrometry*, 29 408-14 (2015)
- [2] M. Olivier, J. C. Tchachame, P. Nemec, M. Chauvet, V. Besse, C. Casagne, G. Boudebs, G. Renversez, R. Boidin, E. Baudet, V. Nazabal. *Optical Materials Express*, 4[3] 525-40 (2014)
- [3] K. Šutorová, L. Prokeš, V. Nazabal, M. Bouška, J. Havel, P. Němec. *Journal of the American Ceramic Society*, 2015, submitted

1Po27

PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE NANOČÁSTICOVÝCH LÉKOVÝCH FOREM PŘÍRODNÍCH IMUNOSTIMULANS

Jiří Trousil^{a*}, Lech Szczepaniak^b, Peter Černoch^a, Martin Hrubý^a, Petr Štěpánek^a

^aÚstav makromolekulární chemie AV ČR, v. v. i. Heyrovského náměstí 2, 162 06 Praha 6 – Břevnov, Česká republika

^bUniversity of Białystok, ul. Marii Skłodowskiej-Curie 14, Białystok, Polsko

* e-mail: jiri.trousil@centrum.cz

Řada přírodních produktů (například včelí propolis) vykazuje množství farmakologických efektů (antibakteriální, antioxidační, imunostimulační aj.). Jejich účinků se využívá zejména v oblasti lidového léčitelství (propolisová kloktadla, rostlinné tinktury apod.), vysoký potenciál přírodních imunostimulans lze však nalézt i ve veterinární medicíně v imunostimulaci včelstev.

Ukazuje se, že příprava kapalných formulací (kloktadel a sirupů) ředěním tinktur připravených extrakcí ethanolem nebo acetonem různých přírodních produktů vede k tvorbě nanočástic (30 – 250 nm) tvořených jejich nerozpustnými složkami.

Koloidní vlastnosti nanočásticových lékových forem bezprostředně souvisejí s terapeutickou účinností. Údaje tohoto charakteru hrají důležitou roli jednak v optimalizaci způsobů příprav, ale také v samotném biologickém testování takovýchto formulací.

Zabývali jsme se proto přípravou a charakterizací kapalných lékových forem, připravených z několika matric (propolis aj.) vykazující imunostimulační účinky, využitelných jak v humánní medicíně, tak v medicíně veterinární. V příspěvku budou shrnuty zásadní aspekty související s přípravou a koloidním chováním nanočástic, přičemž stěžejní technikou charakterizace byl dynamický a statický rozptyl světla a plynově chromatografická separace s hmotnostní spektrometrií.

Tato práce vznikla za podpory grantu TA ČR TA04020318.

1Po28

CRYSTAL, ELECTRONIC STRUCTURE AND O—H---O AND C—H---O INTERACTIONS IN TWO 6-OXOPIPERIDINE-2-CARBOXYLIC ACID DERIVATIVES

Viktor Vrábek¹, 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.vrabek@stuba.sk, ²Institute of Mathematics and Physics, Faculty of Mechanical Engineering, Slovak University of Technology, Námetie slobody 17, Bratislava, SK-81231, Slovak Republic, ³Institute of Organic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, Bratislava, SK-81237, Slovak Republic

Derivatives of the oxopiperidine carboxylic acid are an important class of compounds, which can be used as starting materials for several classes of synthetic drugs, such as enzyme inhibitors [1], immunosuppressors and antibiotics [2].

Both structures have similar six-membered piperidine ring conformations, close to a half-chair. The C atom at the 2-position is displaced by -0.620 (2) Å [- 0.639 (3) Å] from the mean plane defined by the other five atoms N1, C1, C3, C4 and C5 of the ring. For both structures, the piperidine ring-puckering parameters are very similar.

There are a number of strong and weak intra- and intermolecular contacts within the crystal structures. Strong intermolecular O—H...O hydrogen bonds, involving the carboxylate group at the 2-position as H-atom donor and the carbonyl group at the 6-position as H-atom acceptor, link the molecules into infinite C(7) [3]

zigzag chains of molecules along the b and c axis. An additional weak $C \cdots H \cdots O$ interaction between the adjacent chains prompts the formation of a hydrogen-bonded $R_4^4(20)$ sheet motif [3] (Fig. 1).

Calculation of the electron structure provided several indices which characterize the distribution of electron density in the molecule and the multiplicity of atomic bonds. The net charges give a picture of distribution of electron density in the molecule and the values of Wiberg bond indices enable to estimate the multiplicity of individual atomic bonds.

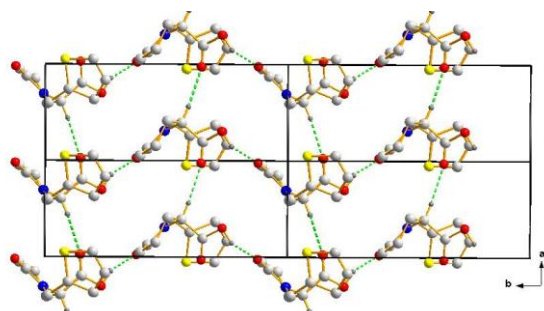


Fig. 1 A stereoview of part of the crystal structure, showing the formation of a hydrogen-bonded sheet of $R_4^4(20)$ rings parallel to (001) .

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract Nos. APVV-0797-11 and APVV-0204-10. 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] Perumattam, J., Shearer, B. G., Confer, W. L., Mathew, R. M.: *Tetrahedron Lett.* **32**, 7183–7186, (1991)
- [2] Sehgal, S. N., Baker, H., Eng, C. P., Singh, K., Veniza, C.: *J. Antibiot.* **36**, 351–354, (1983)
- [3] Bernstein, J., Davis, R. E., Shimon, L., Chang, N.-L.: *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **34**, 1555–1573, (1995)

POSTERY - SEKCIA 2

ANORGANICKÁ A MATERIÁLOVÁ CHÉMIA

2Po01

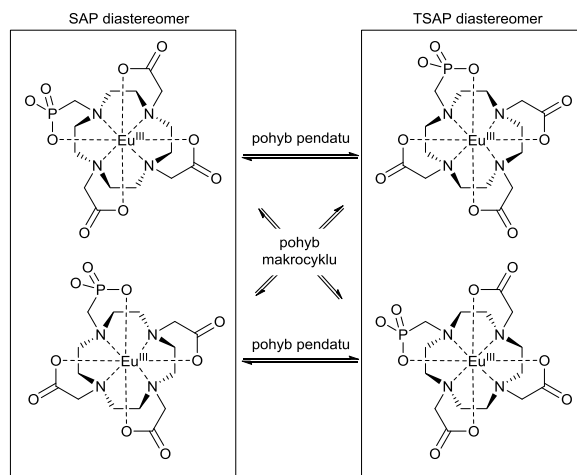
DYNAMIKA KOMPLEXŮ EU(III) S MAKROCYKLICKÝMI LIGANDY POHLEDEM NMR

Jan Blahut¹, Jan Kotek¹, Petr Hermann¹, Zdeněk Tošner¹

¹Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy v Praze

Vývoj nových kontrastních látek pro magnetickou resonanci založených na makrocyclických komplexech úzce souvisí s porozuměním jejich struktury v roztoku. Tím je míněna nejen struktura statická, jak ji mohou popsat metody rentgenové difrakce, ale především dynamika celého systému v roztoku – změna konformace ligandů a flukcionalita koordinačního polyedru. Ideálním nástrojem pro studium dynamických procesů je NMR spektroskopie, která je ale častěji využívána pro studium diamagnetických systémů. Přítomnost nepárových elektronů však přináší řadu omezení, především díky jejímu vlivu na relaxační časy blízkých jader.

V prezentované práci autoři optimalizovali selektivní EXSY pulzní sekvenci a matematické zpracování získaných dat pro využití v paramagnetických systémech a využili získaný nástroj pro studium europitých komplexů založených na derivátech DOTA.^[1] Především byla studována dynamika přeměny mezi isomery TSA a SA vyvolaná překlopením pendantních ramen ligandu, nebo změnou dihedrálního úhlu ethylenového můstku koordinovaného makrocyclu (viz obrázek 1.). Získaná data jasně ukazují vliv výměny jedné karboxylové skupiny ligandu za fosfonátovou na flukcionalitu ligandu, a tím pádem nepřímo na rychlost výměny koordinované vody, jež má zásadní vliv na použitelnost komplexu jako kontrastní látky.^[2]



Obr. 1 Pohyby vedoucí k výměně diastereomerů komplexu [EuDO3AP][−]

Financováno z prostředků GAČR P207/11/1437; Velký dík patří NGI MetaCenrum za poskytnutí výpočetních prostředků a licenci k programům.

- [1] DOTA = 1,4,7,10-tetraazacyclododecane-1,4,7,10-tetraacetic acid
- [2] Rudovský, J., Cígler, P., Kotek, J., Hermann, P., Vojtíšek, P., Lukes, I., Peters J. A., Elst L.V., Muller, R. N.: **2005**, 11(8), 2373–84.

2Po02

PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE NANOČÁSTIC CdS; INKORPORACE DO TENKÝCH VRSTEV As₃₀S₇₀

Vladimíra Gutwirthová, Karel Pálka, Miroslav Vlček

Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10, Pardubice, Česká republika

Tato práce se zabývá přípravou nano-dispergovaného CdS a jeho inkorporací do tenkých vrstev chalkogenidového skla As₃₀S₇₀. K přípravě bylo použito metody obrácených micel, která je vhodná pro přípravu nanočástic do velikosti 5 nm [1]. Reakční směs byla tvořena CdSO₄ a Na₂S v podobě mikroemulze hexan – voda. Jako surfaktant byl použit dioctylsulfosukcinát sodný (AOT). Takto připravené nanočástice byly vyvločkovány fluorothiofenolem (FTP), několikrát promyty hexanem kvůli odstranění přebytku AOT a následně opět rozpuštěny pomocí tetrahydrofuranu (THF) [2]. Díky tomuto bylo možné zakoncentrování roztoku nanočástic a jejich inkorporace do tenké vrstvy (TV) chalkogenidového skla As₃₀S₇₀.

U připravených roztoků nanočástic CdS byla sledována velikost těchto nanočástic pomocí absorpčních spekter a zároveň byla pozorována

jejich luminiscence. Velikost nanočástic CdS byla v rozmezí od 2,6 nm do 4,5 nm v závislosti na koncentraci reakčních činidel, resp. surfaktantu. S rostoucí velikostí nanočástic CdS se posouvalo luminiscenční maximum ze 462 nm do 556 nm. Dále bylo zjištěno, že připravený nanodispergovaný CdS nepodléhá nežádoucí agregaci minimálně po dobu 1 měsíce.

Nanodispergovaný CdS byl v dalším kroku převeden do aminového roztoku skla $As_{30}S_{70}$. Vlastní TV $As_{30}S_{70}$ dotované CdS byly deponovány metodou spin coating s následnou stabilizací teplotou na 60 °C. Takto deponované TV mají optickou kvalitu a jsou dlouhodobě stabilní.

- [1] Preparation of CdS nanoparticles by First-Year Undergraduates – Winkelmann, K., Noviello, T., Brooks, S., Journal of Chemical Education, Vol. 84, 2007.
- [2] Incorporation of CdS nanoparticles from colloidal solution into optically clear ureasilicate matrix with preservation of quantum size effect – Boev, V. I., Soloviev, A., Silva, C. J. R., Gomes, M. J.M., Solid State Sciences (50 – 58), Vol. 8, 2006

2Po03 MOLYBDENANY A VODIVÉ POLYMERY V OCHRANNÝCH ORGANICKÝCH POVLACÍCH

Tereza Hájková¹, Andrea Kalendová¹

¹ Faculty of Chemical Technology, Institute of Chemistry and Technology of Macromolecular Materials, University of Pardubice, Studentská 95, 53210 Pardubice, Czech Republic, e-mail: hajkova.tereza@seznam.cz

Tato práce se zabývala molybdenany, které byly povrchově pokryty vrstvou vodivého polymeru (VP) jako potenciální antikorozi pigmenty. Pro řadu aplikací v ochranných nátěrech je optimálním řešením protikorozi ochrany vytvoření kompozitu, tvořeného anorganickou částicí pigmentu vhodného chemického složení, která je pokryta funkční vrstvou vodivého polymeru (pigment/VP). Výhodou těchto materiálů s obsahem vodivých polymerů, je jejich struktura reagující na okolní prostředí. Pojivo pigmentované takovými částicemi tvoří potom kompozit s vynikajícími mechanickými a chemickými vlastnostmi. Molybdenany jsou netoxické pigmenty s antikorozi vlastnostmi. Rovněž se jeví jako perspektivní pro vytvoření ochranného nátěrového systému. Pokud by tyto anorganické nosiče zachovaly vlastnosti VP, zejména jeho vodivý charakter, jednalo by se o perspektivní materiály v protikorozi ochraně

kovů. Cílem práce bylo zjištění korozi a chemické odolnosti organických povlaků povrchovou úpravou molybdenanů pomocí vodivých polymerů PANI a PPy. Dále prověření složení optimálního pigmentu pro povrchovou úpravu VP a zjistit optimální objemovou koncentraci pigmentu (OKP) nátěru, která je účinná v ochraně před korozi pomocí nátěrové hmoty obsahující tento pigment. Byly formulovány modelové nátěrové hmoty na bázi epoxysterové pryskyřice s obsahem testovaných pigmentů při hodnotách $OKP_{pigment/VP} = 1; 5; 10$ a 15% . Antikorozi účinnost pigmentů byla hodnocena na základě korozi testů odolnosti nátěrů vůči atmosféře s obsahem oxidu siřičitého SO_2 .

Klíčová slova: vodivé polymery, polyanilin-fosfát, polypyrrol-fosfát, organický povlak, antikorozi účinnost

2Po04 CHALKOGENIDOVÁ SKLA SYSTÉMU GE- SE-AS

Martina Hejdová¹, Eva Černošková², Zdeněk Černošek³, Jana Holubová³, Rosen Todorov⁴, Milan Vlček², Kateřina Nechvilová¹

¹ Ústav chemie a technologie makromolekulárních látek, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, Pardubice, Česká republika, martina.hejdova@seznam.cz

² Společná laboratoř chemie pevných látek ÚMCH AV ČR, v.i.i a Univerzity Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Studentská 84, Pardubice, Česká republika

³ Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, Pardubice, Česká republika

⁴ Institute of Optical Materials and Technologies, BAS, Sofia, Bulgaria

Chalkogenidová skla se používají ve formě tenkých filmů (převážně pro optický záznam informací [1]) i jako objemové vzorky (zobrazení v IČ oblasti [2]). Skla systému Ge-Se-As se využívají v obou podobách.

Byla připravena skla systému $Ge_{30}Se_{70-x}As_x$ ($x = 0, 10, 15, 20, 30, 40$). Ve skle $Ge_{30}Se_{70}$ byl selen postupně nahrazován arsenem. Pomocí rentgenové difrakce bylo zjištěno, že vzorky jsou amorfní. Energiově dispezní analýza ukázala, že chemická složení odpovídají složení nominálnímu. Pomocí Ramanovy spektroskopie byla popsána struktura. Sklo $Ge_{30}Se_{70}$ ($x = 0$) je tvořeno hranou (213 cm^{-1}) a rohem (195 cm^{-1}) spojenými tetraedry $GeSe_{4/2}$ a jednotkami Se-Se

(265 cm⁻¹). Ve strukture skel Ge₃₀Se_{70-x}As_x (x = 10, 15, 20, 30, 40) jsou hranou a rohem spojené tetraedry GeSe_{4/2} a pyramidu AsSe_{3/2} [3]. Maxima odpovídajících pásů se pousouvají s rostoucím obsahem arsenu o ~ 20 cm⁻¹. Rovněž relativní intenzity pásů se mění. Teplota skelné transformace (T_g) i izobarické tepelná kapacita v oblasti skelné transformace (ΔC_p) rostou s rostoucím obsahem arsenu. Pro (x = 0) jsou T_g = 338 °C, ΔC_p = 0,199 J/g K. Pro (x = 40) T_g = 405 °C, ΔC_p = 0,454 J/g K. Optická propustnost připravených skel v IČ oblasti je až 75%.

Poděkování: Práce vznikla za podpory Česko-Bulharského výzkumného projektu: "Hybrid structures from chalcogenide glasses and optical polymers for sensors application" a částečně i za podpory Česko-Bulharského výzkumného projektu: "Thin nanostructured films for application in nanophotonics".

- [1] Meineders E.R., Mijiritskii A.V., Van Pietreson L., Wuttig M., Optical Data Storage, (2006)
- [2] Borisova Z.U., Glassy Semiconductors, Plenum Press. New York, (1981)
- [3] Zha.C., Wang R., Smith A., Prasad A., Jarvis A.R., Davies R.B., J. Mater.Sci.: Mater. Electron, (2007)

2Po05 MODIFIKACE ZVYŠUJÍCÍ ANTIBAKTERIÁLNÍ ÚČINEK FOTOAKTIVNÍCH NANOVLÁKENÝCH VRSTEV

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 vrstvy s enkapsulovaným nebo vázaným fotosensitizerem efektivně generují singletový kyslík při ozařování viditelným světlem [1, 2]. V této práci představujeme a porovnáváme tři způsoby modifikace polystyrenového nanovlákněného materiálu s enkapsulovaným 5,10,15,20-tetrafenylporfyrinem vedoucí ke zvýšení efektivity fotooxidace externích substrátů a ke zvýšení antibakteriálního účinku skrze zvýšení smáčivosti povrchu. Toho bylo dosaženo pomocí

pokrytí tenkým filmem polydopaminu, sulfonací, anebo ošetřením pomocí studené plazmy.

Tyto materiály byly před a po modifikaci charakterizovány pomocí zdánlivého kontaktního úhlu, elektronové mikroskopie, „steady state“ a časově rozlišené absorpční a fluorescenční spektroskopie. Dále také pomocí infračervené spektroskopie. Schopnost oxidace externího substrátu byla ověřena pomocí jodidového činidla a antibakteriální vlastnosti byly porovnány vůči modelovému organismu *Escherichia Coli*.

Výsledky této práce potvrzují zásadní role smáčivosti povrchu pro efektivní inaktivaci biologických materiálů na povrchu nanovláken produkujících singletový kyslík s krátkou difúzní dráhou. Jelikož bakterie a dokonce i některé viry [3] nemohou procházet nanovláknennou strukturou těchto materiálů a jsou zachyceny na povrchu, tak díky antibakteriálním/samosterilizujícím vlastnostem jsou tyto materiály perspektivní pro široké uplatnění v medicíně.

Tato práce byla podporována Grantovou agenturou České Republiky (Grant 13-12496S).

- [1] Jiří Mosinger, Oldřich Jirsak, Pavel Kubat, Kamil Lang, Bedřich Mosinger: J. Mater. Chem., (2007)
- [2] Petr Henke, Kamil Lang, Pavel Kubat, Miroslav Šlouf, Jiří Mosinger: ACS Appl. Mater. Interfaces, (2013)
- [3] Yveta Lhotáková, Lukáš Plištil, Alena Morávková, Pavel Kubát, Kamil Lang, Jitka Forstová, Jiří Mosinger: PLoS One, (2012)

2Po06 MERANIE ZMIEN ROZMEROV UHLÍKATÝCH MATERIÁLOV VPLYVOM INTERKALÁCIE SODÍKA DEPONOVANÉHO Z ROZTAVENÝCH SOLÍ

Jana Jurišová¹, Vladimír Danielik¹, Pavel Fellner¹

¹ Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov, FCHPT STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, jana.jurisova@stuba.sk

Interkalácia sodíka do uhlíkového obloženia elektrolyzéra na výrobu hliníka je častou príčinou jeho zlyhania. Napučiavanie uhlíkových materiálov za podmienok bežnej elektrolýzy je dobre známe. V súčasnosti sa však vykonáva rozsiahly výskum za účelom zníženia teploty elektrolýzy a s tým spojenou zmenou zloženia elektrolytu. Vplyv zmeny teploty až na 800 °C na interkaláciu sodíka nie je známy. V tejto práci sa skúmal účinok sodíka na modelových uhlíkových katódových materiáloch v systéme s vysokou

aktivitou sodíka (roztavený systém NaF-NaCl), ale pri nízkej teplote (800 °C – 900 °C). Komerčne dostupné uhlíkové materiály, ako je semigrafít a elektrografít (Kompozit, Topolčany, SK), boli vybrané ako modelové katódy. Experimenty sa vykonali pri konštantnej katódovej prúdovej hustote 0,7 A cm⁻². Na štúdium expanzie vybraných typov uhlíkových materiálov sa vyvinul modifikovaný Rapoportov test. Z výsledkov vyplýva, že znížením teploty sa zvyšuje napučiavanie uhlíkových materiálov, čo je zároveň v súlade s predstavou, že nižšia teplota stabilizuje interkalačné zlúčeniny sodíka s grafitom.

Táto práca bola realizovaná vďaka finančnej podpore grantu VEGA 1/0101/14.

2Po07

STUDIUM VLASTNOSTÍ A STRUKTURY BOROFOSFÁTOVÝCH SKEL BARNATÝCH

Petr Kalenda¹, Ladislav Koudelka¹, Petr Mošner¹, Zdeněk Černošek¹

¹Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, 532 10 Pardubice, ladislav.koudelka@upce.cz

Borofosfátová skla se vyznačují lepší chemickou a termickou stabilitou než fosfátová skla. V tomto příspěvku byla studována skla systému BaO-B₂O₃-P₂O₅. Skla byla připravována reakcí BaCO₃, H₃BO₃ a H₃PO₄ zahříváním na teplotu 900-1400 °C s následujícím vylitím taveniny do grafitové formy a ochlazením na pokojovou teplotu. Skla byla připravena a studována v kompozičních řadách (1-x)Ba(PO₃)₂-xB₂O₃ (řada A), 40BaO-yB₂O₃-(60-y)P₂O₅ (řada B), (50-z)BaO-zB₂O₃-50P₂O₅ (řada C) a (60-w)BaO-wB₂O₃-40P₂O₅ (řada D). Celkem bylo připraveno a studováno 14 homogenních skel s obsahem 0-40 mol.% B₂O₃. Připravená skla byla charakterizována stanovením jejich měrné hmotnosti, molárního objemu a chemické odolnosti. Termické chování skel bylo studováno použitím diferenční termické analýzy, žárové mikroskopie a dilatometrie. Ke studiu struktury skel byla aplikována Ramanova spektroskopie. Připravená skla jsou čirá a propustná v oblasti 300-2500 nm, index lomu skel se pohybuje v rozmezí 1,6-1,8. Jejich teplota skelné transformace roste s obsahem B₂O₃ až na 600°C. Skla jsou poměrně termicky stabilní a jeví malé sklony ke krystalizaci. Ze změn Ramanových spekter se složením skel lze dojít k závěru, že v důsledku vestavování B₂O₃ do

struktury skel dochází k depolymerizaci fosfátových řetězců a k vytváření trojrozměrné strukturní sítě ve studovaných sklech, což vede k pozorovanému zvýšení teploty skelné transformace.

Autoři děkují za finanční podporu Grantové akademii ČR (grant č. 13-00355S) a Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy ČR (SG 350004).

2Po08

DUSIČNAN 3-AMINO-5-METHOXY-4,5-DIHYDRO-1,2,4-TRIAZINIA – NOVÝ SLIBNÝ MATERIÁL PRO GENEROVÁNÍ DRUHÉ HARMONICKÉ FREKVENCE

Matouš Kloda¹, Ivana Císařová¹, Tomáš Janda², Petr Němec², Ivan Němec¹

¹Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, katedra anorganické chemie, Hlavova 8, 128 40 Praha 2, Česká Republika

²Univerzita Karlova v Praze, Matematicko-fyzikální fakulta, katedra chemické fyziky a optiky, Ke Karlovu 3, 121 16 Praha 2, Česká Republika

Aromatické molekuly bývají zpravidla díky snadné polarizovatelnosti dobrými nositeli nelineárně optických (NLO) vlastností a v případě amino substituovaných dusíkatých heterocyklů je tato tendence ještě posílena přítomností donoru a akceptoru elektronů. Nicméně díky poměrně velkému dipólovému momentu často tvoří v krystalové struktuře centrosymetrické páry, což vylučuje existenci některých fyzikálních vlastností jako např. generování druhé harmonické frekvence (SHG). Proto je výhodné tyto nositele NLO vlastností doplnit o vazebné partnery, jako například anorganické anionty, kteří mohou potlačit preferovanou tvorbu centrosymetrických párů.

Na základě kvantově-chemických výpočtů byl 3-amino-1,2,4-triazin vybrán jako vhodná výchozí sloučenina pro přípravu nových krystalických materiálů pro nelineární optiku. V kyselém prostředí navíc dochází k nukleofilní adici na triazinový cyklus za vzniku chirálních produktů [1], což zvyšuje pravděpodobnost necentrosymetrického uspořádání nutného pro SHG.

Neutralizační reakcí 3-amino-1,2,4-triazinu s kyselinou dusičnou za současné adice molekuly methanolu na kationt 3-amino-1,2,4-triazinia byl připraven dusičnan 3-amino-5-methoxy-4,5-dihydro-1,2,4-triazinia. Získaný necentrosymetrický materiál byl nejprve charakterizován pomocí metod vibrační spektroskopie a RTG

difrakce. Dále byly studovány optické vlastnosti a měřena účinnost SHG pro práškové vzorky o definované velikosti částic.

Autoři děkují Grantové agentuře ČR za podporu v rámci projektu 14-05506S.

[1] Adrien Albert: *Advances in Heterocyclic Chemistry* **20**, 117 (1976).

2Po09

EFFECT OF CALCINATION

TEMPERATURE OF Ni-Ce/Al₂O₃

CATALYSTS ON THE STRUCTURE OF Ni-SPECIES AND CATALYTIC ACTIVITY IN DRY REFORMING OF CH₄

Martin Kout¹, Lucie Smoláková¹, Victor Manuel Gonzalez-Delacruz², Alfonso Caballero², Libor Čapek¹

¹*Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, 530 02 Pardubice, Czech Republic,*

Martin.Kout@student.upce.cz

²*Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla (CSIC-University of Seville) and Departamento de Química Inorganica, University of Seville, 410 92 Seville, Spain*
Synthesis gas (mixture of H₂ and CO) is intermediate in the methane utilization into more valuable chemicals. It can be produced via steam reforming of methane, dry reforming of methane (DRM), etc. DRM provides synthesis gas with molar ratio of H₂:CO equal to 1, which is suitable for Fischer-Tropsch synthesis or methanol production. Nickel based catalysts are studied due to its low costs and high activity. Disadvantages are coke deposition or sintering. Addition of cerium prevents coke deposition or sintering.

Nickel based catalysts (11 wt. % of Ni and 3 wt. % of Ce) were prepared by impregnation method. Catalysts were calcined in the temperature range 500 – 1000 °C. Catalysts were characterised by XRD, N₂-physisorption, H₂-TPR, UV-vis and SEM. Two types of catalytic experiment were done; a) without any pre-treatment and b) with in-situ reduction prior the reaction.

In all cases, in-situ reduction has a positive effect on catalytic performance of studied catalysts. Higher activity and stability is connected with smaller particle diameter. Moreover, it induces formation of filamentous carbon deposits. Increasing calcination temperature shifts TPR reduction peaks to higher temperatures, which was assigned to the formation of nickel aluminate. Nickel aluminate is not active in the DRM.

2Po10

LANTHANIDE(III)-DOTA-LIKE COMPLEXES WITH PENDANT AMINOPHOSPHONATE AS NEW PARACEST CONTRAST AGENTS FOR MRI

Tereza Krchová¹, Jan Blahut¹, Ivana Císařová¹, Jan Kotek¹

¹*Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, Charles University in Prague, tereza.krchova@natur.cuni.cz*

In addition to commonly used MRI contrast agents (CAs), that shorten longitudinal (T₁) and/or transversal (T₂) relaxation times,[1] a new class of CAs based on Paramagnetic Chemical Exchange Saturation Transfer (PARACEST) mechanism was introduced in the past decade and exhibits a high potential to extend the imaging capabilities of MRI.[2]

It was shown that Ln(III) complexes of cyclen derivatives with pendant arms containing (semi)coordinated amino group produce pH-sensitive PARACEST effect in the pH region relevant for living systems.[3] Therefore, we decided to synthesize a new macrocyclic ligand DO3A-NP containing aminophosphonate coordinating pendant arm and to study its Ln(III) complexes as potential pH-dependent PARACEST CAs.

The ligand DO3A-NP as well as its complexes have been prepared and studied; synthesis, characterization, rentgenostructural studies and study of isomerism of these compounds will be described and presented in more detail. PARACEST effect of the aqueous solutions of Eu(III) and Yb(III) complexes with DO3A-NP was explored by NMR spectrometer and it was shown that amino group of coordinated pendant arm in these Ln(III) complexes mediates NMR saturation transfer to the bulk water signal in the pH range relevant to the physiological conditions.

This research was supported by the Grant Agency of the Czech Republic (Grant No. P207/11/1437) and by the Grant Agency of the Charles University (Grant No. 110213).

- [1] P. Hermann, J. Kotek, V. Kubiček and I. Lukeš, *Dalton Trans.*, 2008, 3027–3047
- [2] D. V. Hingorani, A. S. Bernstein and M. D. Pagel, *Contrast Media Mol. Imaging*, 2014, DOI: 10.1002/cmmi.1629
- [3] T. Krchová, J. Kotek, D. Jiráček, J. Havlíčková, I. Císařová and P. Hermann, *Dalton Trans.*, 2013, 42, 15735–15747

2Po11 KRYŠTÁLOVÁ ŠTRUKTÚRA (2,1,3-BENZOSELENADIAZOL-4-YL)AMINOMETYLÉNMALÓNANU ETYLOVÉHO

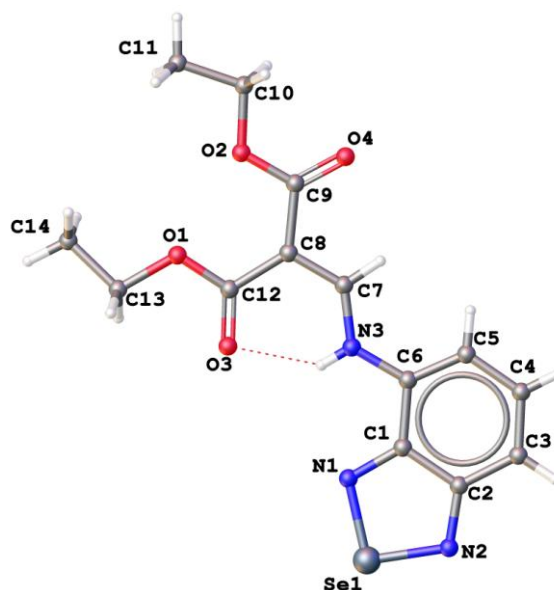
Ján Lokaj¹, Ján Moncol¹, Maroš Bella², Viktor Milata¹

¹Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU, 812 37 Bratislava, Radlinského 9, jan.lokaj@stuba.sk,

²Chemický ústav SAV, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava

Enolétery sú reaktívne organické zlúčeniny všeobecného vzorca RO-CH=CXY, kde v prípade, že X a Y sú elektrónakceptorné skupiny, môže prísť k nukleofilnej vinylovej substitúcii alkoxykupiny RO- za vzniku odpovedajúcich intermediátov pre organickú syntézu. V prípade, že nukleofilom je aminoskupina, hovoríme o enamínoch. Ak je aminoskupinou aminoskupina anilínu, získame anilinometylénové deriváty, ktoré sú vynikajúcimi východiskovými substrátmi pre 4-chinolóny: zlúčeniny s prvotnou antibakteriálnou, no teraz aj s mnohými inými biologickými vlastnosťami. V prípade (poly)substituovaných či kondenzovaných anilínov vznikajú odpovedajúce (poly)substituované či kondenzované 4-chinolóny. Popisovaná zlúčenina patrí práve do tejto poslednej skupiny¹.

Kryštálová štruktúra horeuvedenej zlúčeniny bola určená difrakciou rtg. žiarenia. Zlúčenina kryštalizuje v monoklinickom systéme s priestorovou grupou $P2_1/n$. Molekulová štruktúra je stabilizovaná intramolekulovými vodíkovými väzbami medzi amínovou skupinou a kyslíkovým atómom z jednej esterovej skupiny.



Obr. 1

Molekulová štruktúra (2,1,3-benzoselenadiazol-4-yl)aminometylénmalónanu etylového

- [1] Viktor Milata, Mária Omastová: ChemZi, (2011) Bella M., Schulz M., Milata V., Koňariková K., Breza M.: Application of the Gould-Jacobs reaction to 4-amino-2,1,3-benzoselenadiazole. Tetrahedron 66 (41), 8169 – 8174, 2010

2Po12 LIKVIDACE ODPADNÍCH VOD Z VÝROBY TŘASKAVIN

Libor Mastný

Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 16628 Praha, libor.mastny@vscht.cz

Výroba třaskavin je nebezpečným, ale lukrativním odvětvím chemických výrob. K nejpoužívanějším patří látky na bázi olovnatých sloučenin (azid, trinitrorezorcinát). Evropská chemická legislativa REACH však vyhlásila olovo tvrdý boj. Téměř všechny jeho sloučeniny byly zařazeny mezi látky SVHC (vzbuzující velké obavy). Došlo ke změně přílohy XVII Nařízení, která výrazným způsobem omezí výrobu látek a jejich uvádění na trh (Nařízení Komise (EU) 2015/628). Výrobci látek, směsí a předmětů musí postupně nalézt vhodné alternativy, popř. za povolení uvést „olovo“ na trh zaplatit nemalé částky. Přesto, že výroba třaskavin není velkoobjemová, týkají se postupná omezení sloučenin olova i tohoto odvětví.

Jednou z možných náhrad olovnatých třaskavin je výroba draselné soli 4-hydroxy-4,6-dihydro-5,7-dinitrobenzofurazan-3-oxidu, která neobsahuje

žiadny toxický kov. Vzniklá traskavina KDNBF není klasická iontová sůl, ale má vlastnosti mimořádně stabilního Meisenheimerova komplexu. Vznikající produkt je poměrně dobře rozpustný ve vodě a může být znečištěn vstupní surovinou DNBF, která patří do kategorie trhavín. Všechny uvedené nevýhody mohou negativně ovlivnit likvidaci odpadů po výrobě.

Vstupní surovina i produkt mají strukturu podobnou olovnatým traskavinám na bázi substituovaných fenolů. K likvidaci vzniklých odpadů byla proto použita metoda založená na oxidaci organické části okyseleným roztokem manganistanu draselného. Výhodou patentované metody [1] je její univerzálnost při likvidaci odpadů z výrob různých traskavin.

- [1] Valenta P., Srank Z., Mastny L., Hlavsa M., Hnat I. Method for Decontamination of Explosives Production Process Waste Water, EP Patent 2170773 B1, October, 2012

2Po13

FOTOKATALYTICKÁ AKTIVITA SONOCHEMICKY RIPRAVENÉHO TiO_2 DOPOVANÉHO NANOČASTICAMI UŠLACHTILÝCH KOVŮ

Robert Michal¹, Mária Čaplovičová², Gustav Plesch¹

¹Katedra anorganické chémie Prírodovedeckej fakulty Univerzity Komenského v Bratislave,

842 15 Bratislava, michal@fns.uniba.sk

²Katedra ložiskovej geológie Prírodovedeckej fakulty Univerzity Komenského v Bratislave,

842 15 Bratislava

TiO_2 je v súčasnosti stále najvýznamnejší fotokatalyzátor. Po mnohých viac či menej úspešných pokusoch s látkami iného charakteru sa dnes venuje pozornosť kompozitným fotokatalyzátorom na báze TiO_2 s inými polovodivými oxidmi. Takéto systémy dokážu absorbovať žiarenie aj vo VIS oblasti, prípadne dramaticky zmeniť vlastnosti TiO_2 [1]. Špeciálnym prípadom kompozitov sú fotokatalyzátory dopované nanočasticami ušľachtilých kovov ako Ag a Au. Tu sa prejavuje efekt povrchovej plazmónovej rezonancie, separácia nábojov a nižšia rýchlosť rekombinácie nábojov [2,3].

Cieľom tejto práce bolo preskúmať fotokatalytické vlastnosti sonochemicky pripraveného TiO_2 za rôznych podmienok, ako sú čas ožarovania ultrazvukom, použitie kontinuálneho resp. pulzného módu, výkon ultrazvuku, teplota žihania a použitia

surfaktantov. Skúmal sa vplyv nanočastíc kovov a ich množstva na fotokatalytickú aktivitu. Na stanovenie fotokatalytickej aktivity bola použitá metóda stanovenia úbytku celkového organického uhlíka (TOC). Ako modelová látka bol použitý roztok fenolu. Suspenzie roztokou fenolu a fotokatalyzátora sa ožarovali metalhalogenidovou výbojkou simulujúcou slnečné žiarenie za stáleho miešania a prístupu vzduchu. Vzorky boli charakterizované metódami XRD, Ramanovou spektroskopiou a rastrovacou elektrónovou mikroskopiou (REM).

Tento výskum bol realizovaný vďaka Grantu mladých UK, č. UK/17/2015 a Grantu VEGA 1/0276/15.

- [1] W-T. Chen et Al. *Int. J. Of Hydrogen Energy*. 2013, 38, 15036–15048
[2] W. Hou, S.B. Cronin. *Adv. Funct. Mater.* 2013, 23, 1612–1619
[3] T. Liu et al. *Applied Catalysis B: Environmental* 2015, 165, 378–388

2Po14

FOTOKATALYTICKÉ VLASTNOSTI V-DOPOVANÝCH NANORÚROK TiO_2 ŽIHANÝCH V OXIDAČNEJ A REDUKČNEJ ATMOSFÉRE

Martin Motola¹, Gustav Plesch¹, Leonid Satrapinsky², Marián Mikula², Tomáš Roch², Maroš Gregor²

¹Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Katedra anorganické chémie, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava 4, Slovenská republika, martinmotola@gmail.com

²Univerzita Komenského, Fakulta matematiky, fyziky a informatiky, Katedra experimentálnej fyziky, 842 48 Bratislava, Slovenská republika;

V dôsledku stabilnej štruktúry, mechanickej i chemickej stability a pri súčasnom vysokom špecifickom povrchu majú nanorúrky TiO_2 (TiO_2NTs) potenciálne uplatnenie pri produkcii vodíka, ako senzory plynov a v neposlednom rade ako fotokatalyzátory [1]. Žihamím vanádom dopovaných TiO_2NTs v redukčnej atmosfére môže dôjsť k čiastočnej redukcii Ti^{4+} na Ti^{3+} , V^{5+} na V^{4+} a V^{3+} , kde podobne ako v polovodičoch p-typu vznikajú elektrónovo deficitné oblasti. Do pásovej štruktúry je zavedená diskretná neobsadená hladina. [2]. Dopanty znižujú veľkosť E_{BG} fotokatalyzátorov na hodnoty zrovnateľné s vlnovou dĺžkou viditeľného svetla vnesením nových energetických hladín do zakázaného pásu TiO_2 [3].

Práca je zameraná na prípravu nanorúrok oxidu titaničitého dopovaných vanádom a štúdium

vplyvu čiastočnej redukcie na fotokatalytické vlastnosti. Vzorky boli pripravené magnetrónovým naprášením titánu na monokryštalický substrát kremíka. Vertikálne orientované TiO_2NTs boli syntetizované elektrochemickou anodickou oxidáciou pri konštantnom napätí a čase. Vanád bol na vzorky dopovaný impregnáciou z prekursoru, alkoxidu vanádu. Jedna séria vzoriek bola žihaná v oxidačnej atmosfére vzduchu, druhá séria v redukčnej atmosfére, H_2/Ar . Morfológia TiO_2NTs sa charakterizovala skenovacou elektrónovou mikroskopiou, fázové zloženie röntgenovou difraktometriou. Fotokatalytická aktivita vzoriek bola vyhodnotená zo schopnosti fotokatalyzátora degradovať farbivo Rhodamine B. Fotokatalyticky najaktívnejšou je čiastočne redukovaná vzorka TiO_2NTs dopovaná 1% vanádu.

Ďakujeme za finančnú podporu grantovej agentúry VEGA (projekt č. 1/0276/15) a Grantu UK č. UK/85/201.5

- [1] Grimes C.A., et al. *Sensors and Actuators B* (2003)
 [2] Housecroft C.E., et al. *Anorganická chémia* (2012)
 [3] Taga Y. et al. *Thin Solid Films* (2008)

2Po15

VYUŽITÍ POVRCHOVÉ ÚPRAVY PIGMENTŮ NA BÁZI SiO_2 VRSTVOU VODIVÉHO POLYMERU

Kateřina Nechvilová¹, Kateřina Matoušová², Andréa Kalendová¹

¹ Univerzita Pardubice, Studentská 95, 523 10

Pardubice 2, katerina.nechvilova@student.upce.cz

² Střední průmyslová škola chemická, Poděbradská 94, 530 09 Pardubice

Tato práce se zabývá korozní ochranou kovových podkladů, které vlivem atmosférických procesů, podléhají destrukci zvané koroze materiálů. Tomuto procesu je možné zabránit penetrací povrchu kovového podkladu organickým nátěrem. V této práci byly připraveny modelové nátěrové hmoty, obsahující pigmentové částice na bázi SiO_2 , které byly pokryty vrstvou vodivého polymeru polyanilinu (PANI), poly(p-fenylendiaminu) (PPDA). Jako srovnávací povrchová úprava sloužila chemická vrstva zinkferitu (ZnFe_2O_4). Jako pojivo byla použita epoxysterová pryskyřice rozpouštědlového typu. Připravené modelové nátěrové hmoty byly formulovány při $\text{OKP}_{\text{test.pigmentu}} = 1$ a 10 %. Nátěrové hmoty byly aplikovány na ocelové a skleněné panely. Takto připravené nátěrové filmy

byly testovány pomocí destrukčních mechanických zkoušek odolnosti. Vytvrzené organické povlaky byly otestovány elektrochemickou metodou a následně vystaveny vlivu korozního prostředí s obsahem SO_2 mlhy simulující průmyslově znečištěnou atmosféru. Modelové nátěrové filmy byly vyhodnoceny pomocí celkové i komplexní antikoroze a mechanické účinnosti.

2Po16

VPLYV ULTRAZVUKOVEJ KAVITÁCIE NA TVORBU $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$

Daniela Nýblová¹, Peter Billík^{1,2}, Roman Bystrický³, Juraj Filo⁴

¹ Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra anorganickej chémie, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovenská republika, nyblova@fns.uniba.sk

² Slovenská akadémia vied, Ústav merania, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, Slovenská republika

³ Slovenská akadémia vied, Ústav anorganickej chémie, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, Slovenská republika

⁴ Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Chemický ústav, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovenská republika

Najvýznamnejšia oblasť využitia $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, keramický priemysel, vyžaduje, aby bol východzí prášok používaný na výrobu keramiky čo najjemnejší. $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ možno vyrobiť z tradičných prekursorov, ktorými sú oxidy, hydroxidy a soli hliníka, pri teplote vyššej ako 1100 °C [1,2]. Takto vysoká teplota podporuje rast zŕn prášku, ktorý sa následne musí podrobiť mechanickému mletiu, aby sa získali prášky s časticami s malými rozmermi. Z tohto dôvodu sa možnostiam prípravy $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ pri nižšej teplote ako 1100 °C venuje rozsiahly výskum.

Táto práca je zameraná na vplyv ultrazvukovej kavitácie na tvorbu $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ zo zásaditého chloridu hlinitého, ktorý bol pripravený parciálnou hydrolýzou Al^{3+} . Sledovali sme vplyv doby ultrazvukovej aktivácie na prítomnosť polymérnych častíc zásaditého chloridu hlinitého a na následnú teplotu tvorby $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$. $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ bol pripravený z ultrazvukovo aktivovaných vzoriek zásaditého chloridu hlinitého kalcináciou na vzduchu. Prítomnosť polymérnych častíc v zásaditom chloride hlinitom bola sledovaná pomocou ^{27}Al NMR spektroskopie. Na detekciu $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ bola použitá prášková röntgenová difrakčná analýza. Ultrazvuková kavitácia má priaznivý vplyv na nízkoteplotnú tvorbu $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$

pripraveného zo zásaditého chloridu hlinitého, pričom najnižšia dosiahnutá teplota jeho tvorby bola 500 °C.

Ďakujeme grantovej agentúre VEGA za finančnú podporu projektu č. 2/0092/14 a Univerzite Komenského za finančnú podporu Grantu UK č. UK/84/2015.

- [1] Wefers, K., Misra, C. (1987) Oxides and Hydroxides of Aluminum. In: Alcoa Technical Paper no. 19. Alcoa Laboratories, Pittsburgh, USA, p. 1
- [2] Levin, I. and Brandon, D. (1998) J. Am. Ceram. Soc. 81 (8), p. 1995

2Po17

OPTIMIZATION OF SELECTIVITY AND RATE OF COMPLEXATION OF COPPER RADIOISOTOPES

Monika Paúrová¹, Jan Kotek¹, Petr Hermann¹

¹Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, Charles University, Hlavova 2030, 12840 Prague 2, Czech Republic, monika.paurova@natur.cuni.cz

Radioisotopes of copper have a great potential for wide use in nuclear medicine. Especially ⁶¹Cu ($\tau_{1/2}$ = 3.3 h, β^+ emitter), ⁶⁴Cu ($\tau_{1/2}$ = 12.7 h, β^+/β^- emitter) or ⁶⁷Cu ($\tau_{1/2}$ = 61.8 h, β^- emitter) show suitable properties for both diagnosis and therapy. From point of view of *in vivo* applications, in particular, a high thermodynamic stability, a fast complexation and a high kinetic inertness of the complexes used are the main topics to be solved.

In this case, cyclam (1,4,8,11-tetraazacyclotetradecane) is one of the best candidates for these studies because its derivatives form ones of the most stable known complexes of divalent copper. Optimization of the macrocyclic ligands' design by suitable coordinable pendant arm(s) can improve desired properties.^[1,2]

Therefore, nine new cyclam-based ligands with different acid pendant arms (Figure 1) were synthesized and characterized. These derivatives were also investigated by ¹H and ³¹P NMR titration (comparison of protonation constants $\log\beta_h$) and by kinetic studies (formation and acid-assisted dissociation studies of the copper complexes).

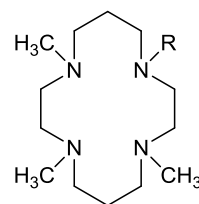


Figure 1. General structure of ligands

This work was supported by Grant Agency of Charles University (Grant No. 327515) and by Grant Agency of the Czech Republic (Grant No. P207/11/1437).

- [1] M. Paúrová, J. Havlíčková, A. Pospíšilová, M. Vetrík, I. Cisařová, H. Stephan, H. J. Pietzsch, M. Hrubý, P. Hermann, J. Kotek, *Chem. Eur. J.*, **2015**, 21, 4671–4687
- [2] I. Svobodová, J. Havlíčková, J. Plutnar, P. Lubal, J. Kotek, P. Hermann, *Eur. J. Inorg. Chem.*, **2009**, 3577–3592

2Po18

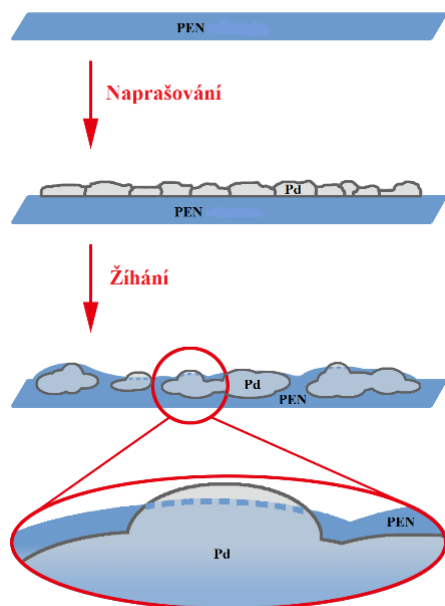
ANTIBAKTERIÁLNÍ ÚČINKY PALLADIOVÝCH NANOSTRUKTUR DEPONOVANÝCH NA POLYETHYLENNAFTALÁT

Markéta Polívková¹, Zdeňka Novotná¹, Jakub Siegel¹, Václav Švorčík¹

¹Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha, polivkoa@vscht.cz

Použití neošetřených zdravotnických prostředků (katétry, endotracheální trubice) může vést ke vzniku infekcí, které jsou v příčinné souvislosti s hospitalizací [1, 2]. Antibakteriální povlaky biokompatibilních polymerů tak mohou efektivně snížit riziko vzniku těchto komplikací [3]. Palladiové nanovrstvy o proměnných tloušťkách byly připraveny naprašováním na polyethylen-naftalát (PEN) a byly studovány jejich vlastnosti před a po tepelném namáhání. Tepelné namáhání bylo použito k transformaci nanovrstev v oddělené kovové ostrůvky na povrchu polymeru (obr. 1). Antibakteriální vlastnosti připravených nanostruktur byly zkoumány pomocí gramnegativních a grampozitivních kmenů bakterií. Ke studiu způsobu bakteriální inhibice Pd nanostruktur byly použity následující metody: hmotnostní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem, rentgenová fotoelektronová spektroskopie a mikroskopie atomárních sil. Bylo zjištěno, že antibakteriální účinek Pd nanostruktur může být vyvolán (i) uvolňováním Pd iontů do fyziologického roztoku a (ii) přímým kontaktem bakterií s Pd strukturami. Naše výsledky naznačují, že vzorky o efektivní tloušťce Pd

vrstvy 22,4 nm vykazujú výrazne vyšší antibakteriální účinky, než tenčí Pd vrstvy.



Obr. 1 Transformace deponované Pd nanovrstvy na Pd nanostrůvky začleněné do polymeru po vyžhání

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č.20/2015).

- [1] Robert A. Weinstein, Robert Gaynes, Jonathan R. Edwards: Clin. Infect. Dis., (2005)
- [2] Xiao Li, Qiang Yuan, Li Wang, Liang Du, Lijing Deng: JEBM, (2012)
- [3] Tobi B. Karchmer, Eve T. Giannetta, Carlene A. Muto, Barbara A. Strain, Barry M. Farr: Arch Intern Med., (2000)

2Po19

LASER ABLATION GENERATION OF Sb_mAs_n CLUSTERS FROM MIXTURES OF ELEMENTS AND Sb-As NANO-LAYERS. LASER DESORPTION IONIZATION QUADRUPOLE ION TRAP TIME-OF-FLIGHT MASS SPECTROMETRY

Lubomír Prokeš^{1,2,3}, Vlasta Štěpánová², Kristína Hajtmanová¹, Milan Alberti^{1,2,3}, Eladia María Peña-Méndez⁴, and Josef Havel^{1,2,3}

¹Department of Chemistry, Faculty of Science, Masaryk University, Kamenice 5/A14, 625 00 Brno, Czech Republic, luboprok@gmail.com

²Department of Physical Electronics, Faculty of Science, Masaryk University, Kotlářská 2, 611 37 Brno, Czech Republic

³CEPLANT, R&D Center for Low-Cost Plasma and Nanotechnology Surface Modifications, Masaryk University, Kotlářská 2, 611 37 Brno, Czech Republic

⁴Department of Chemistry, Faculty of Science, University of La Laguna, Campus de Anchieta, 38071 La Laguna, Tenerife, Spain

Antimony arsenides exist in nature as allemontite (stibarsen, SbAs) and paradocrasite (Sb_3As) minerals [1]. As it was newly reported, antimony arsenide (SbAs) forms layered materials, important in optoelectronics [2-3]. They have two-dimensional (2D) structure similar to that of graphene.

In this work generation of antimony arsenide clusters was studied. The Sb_mAs_n clusters were produced either via laser ablation of antimony and tellurium mixtures or from Sb-As nano-layer deposited on silicon wafer with Physical Vapour Deposition (PVD) – thermal evaporation method. Mass spectra were measured using a mass spectrometer equipped with quadrupole ion trap and time of flight mass analyser (reflectron mode).

Formation of positively and negatively charged Sb_m , As_n and Sb_mAs_n clusters was observed during the laser ablation of the precursors. The stoichiometry of the Sb_mAs_n clusters was determined by computer modelling. Possible structures of clusters are discussed.

Concluding, ten new clusters Sb_mAs_n ($m = 1 - 4$; $n = 1 - 4$) were identified (not described in the literature). The knowledge about the generation of these clusters and their composition might be useful as a motivation to synthesize new Sb-As materials with specific properties.

The work has been supported from Grant Agency of Czech Republic (Projects No. 13-05082-S). Also support from the project R&D centre for low-cost

plasma and nanotechnology surface modifications CZ.1.05/2.1.00/03.0086 funding by European Regional Development Fund is acknowledged. This research has been also supported by the project CZ.1.05/2.1.00/03.0086 funded by European Regional Development Fund and project LO1411 (NPU I) funded by Ministry of Education Youth and Sports of Czech Republic. E. M. Peña-Méndez thanks the University of La Laguna for their support.

- [1] G. P. Bernardini, C. Cipriani, F. Corsini, G. G. T. Guarini, G. Mazzetti, L. Poggi: *Mineral. Mag.* 51 (1987), 295-304.
- [2] D. P. Shoemaker, T. C. Chasapis, D. Do, M. C. Francisco, D. Y. Chung, S. D. Mahanti, A. Llobet, M. G. Kanatzidis: *Phys. Rev. B* 87 (2013), 094201.
- [3] L. Kou, Y. Ma, X. Tan, T. Frauenheim, A. Du, S. Smith: *J. Phys. Chem. C* 119 (2015), 6918-6922.

2Po20

STUDY OF THE INORGANIC MATERIALS INFLUENCE IN TREAD COMPOUNDS

Zuzana Mičicová¹, Mariana Pajtašová¹, Lukáš Raník¹, Darina Ondrušová¹

¹Faculty of Industrial Technologies in Púchov, I. Krasku 491/30 020 01 Púchov, lukas.ranik@fpt.tnuni.sk

The presented paper deals with preparation of the inorganic materials (montmorillonite) and their subsequent application in rubber compounds (tread). We studied parameter changes of curing characteristics (M_L , M_H , t_s , t_{c90} , R_v) for unvulcanized rubber compounds, physical-mechanical properties (hardness, tensile strength, elongation) of resultant vulcanizates.

Montmorillonite occurs as heteroionic form with various exchangeable hydrated cations (Na^+ , K^+ , Ca^{2+} , Mg^{2+}) in interlayer space. The type of the predominant exchangeable cation significantly affects the structure of interlayer and properties of montmorillonite. Therefore it is recommended to use monoionic forms which are more precisely defined and compared to each other [1].

In the material research of the polymeric materials, the current trend includes research of polymers in combination with clay minerals [2]. The economic as well as environmental aspects are the reasons for the mentioned investigation of clay minerals with polymers. Compared to conventional types of filler, small amount of clay mineral can have beneficial effect on modification of the physical and chemical properties relating to polymeric materials. The influence of filler on polymeric materials depends on its physical properties, such

as particle size, surface reactivity, surface area, electrical charge of the particle and chemical properties, such as reactivity with accelerators and pH [3].

Acknowledgement, the authors are grateful to the Slovak Grant Agency KEGA 007TnUAD-4/2013, KEGA 006TnUAD-4/2014 and VEGA 1/0385/14 for financial support.

- [1] Měřínská, D.: *Plasty a kaučuk*, (2005)
- [2] Faheem Uddin: *Advances in Materials Science and Engineering*, (2013)
- [3] Shiny Palaty, Rani Joseph: *Iranian Polymer Journal*, (2004)

2Po21

TAYLORING OF PEEK BIOACTIVITY: IMPACT OF PLASMA AND GOLD SPUTTERED INTERFACE

Alena Řezníčková¹, Jakub Siegel¹, Václav Švorčík¹

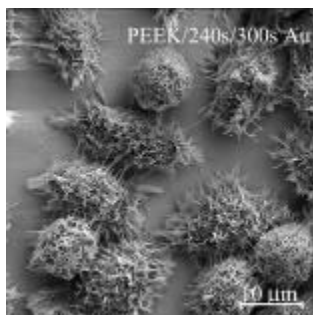
¹Department of Solid State Engineering, University of Chemistry and Technology, 166 28 Prague 6, Czech Republic, reznicka@vscht.cz

Polyetheretherketone (PEEK) has been used as an alternative to metallic implants for orthopaedic and active medical implant applications. PEEK has shown neither cytotoxicity nor mutagenicity *in vitro*. Surface properties playing the most important role in cell adhesion are: surface hydrophilicity, morphology, roughness, energy, charge, and chemical composition. Plasma treatment has been previously used to modify polymer surface to improve its biocompatibility [1, 2].

This paper presents a novel way of PEEK modification resulting in asymmetric samples with two different types of the surface: plasma activated and gold sputtered and its impact on adhesion of mouse fibroblasts (L929). The surface properties of pristine PEEK and its modified counterparts were studied by several techniques, such as XPS, goniometry, AFM and SEM. Biological response of L929 cells seeded on pristine and plasma treated PEEK matrices was evaluated in terms of cell adhesion, spreading, morphology, proliferation, and metabolic activity.

Plasma treatment increased the surface wettability of PEEK and led to changes in its surface morphology and chemistry. The XPS method showed a decrease in carbon concentration and increase of gold concentration with increasing plasma treatment. Cell adhesion measured on

prepared samples was directly proportional to the thickness of the gold layer on the sample.



Obr. 1 SEM image of L929 cells cultivated (72 h) on PEEK treated by plasma for 240 s and gold sputtered for 300 s.

This work was supported by GACR projects 14-18149P and 14-18131S.

- [1] A. Reznickova, Z. Makajova, N. Slepickova Kasalkova, Z. Kolska, V. Svorcik, Iran. Polym. J. 23, 227-236, 2014.
- [2] F. Awaja, D.V. Bax, S. Zhang, N. James, D.R. McKenzie, Plasma Process. Polym. 9, 355-362, 2012.

2Po22

METAL NANOPARTICLES FOR BIOLOGICAL APPLICATIONS

Jakub Siegel, Marek Staszek, Markéta Polívková, Alena Řezníčková, Václav Švorčík

¹*Department of Solid State Engineering, University of Chemistry and Technology, 166 28 Prague 6, Czech Republic, reznicka.@vscht.cz*

Over the past decades, noble metal nanoparticles (NMNPs) have been widely studied due to their unique optical, catalytic, electromagnetic and bactericidal properties, which are strongly influenced by their shape and size and are not achievable in their bulk state [1-5]. Due to their biocompatibility, gold, silver, palladium, and platinum nanoparticles might show an exceptional performance in several biomedical applications, such as drug delivery and antimicrobial agents. However, the comprehensive study including antibacterial and cytotoxic effects of the family of noble metal nanoparticles (NMNPs) has not yet been published.

In this work, we prepared NMNPs by metal sputtering into anhydrous glycerol and compared their bactericidal effects with their cytotoxic properties. Since the well-controlled size and the size-distribution of NPs are essential in their further biological assessment, they were analysed by transmission electron microscopy and dynamic

light scattering. Concentration of NP solutions was measured by atomic absorption spectrometry.

Performed analyses proved that we successfully prepared spherical NPs with pretty narrow size-distribution. Since both hypertonic and hypotonic solutions hinder proper cell growth and increase their mortality the NP solution osmolality was adjusted to match physiological conditions (isotonic environment). Interestingly, all metals were efficient in suppression of *S. epidermidis* contrary to ineffective inhibition of Gram-negative *E. coli*, which was partially suppressed only by AgNPs. We have shown that the highest cytotoxicity exhibited Pt and AgNPs, lower cytotoxic potential was observed for PdNPs, and the lowest for AuNPs. We believe that these results may open up tremendous possibilities in the field of biomedicine.

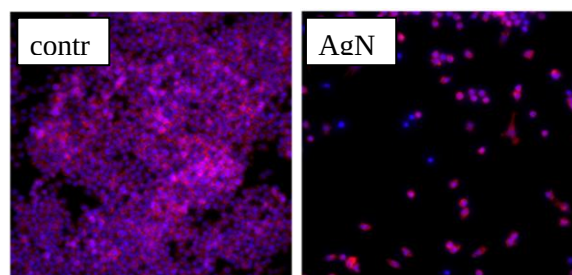


Illustration of inhibition effect of AgNPs (concentration of 1000 $\mu\text{g.l}^{-1}$) on mouse macrophages RAW 264.7

This work was supported by GACR under the projects Nos.14-18131S and 14-18149P.

- [1] M. Grzelczak, J. Perez-Juste, P. Mulvaney, L.M. Liz-Marzan, Chem Soc Rev. 37 (2008) 1783-1791.
- [2] M. Staszek, J. Siegel, K. Kolarova, S. Rimpelova, V. Svorcik, Micro & Nano Letters. 9 (2014) 778-781.
- [3] J. Siegel, K. Kolarova, V. Vosmanska, S. Rimpelova, J. Leitner, V. Svorcik, Mater Lett. 113 (2013) 59-62.

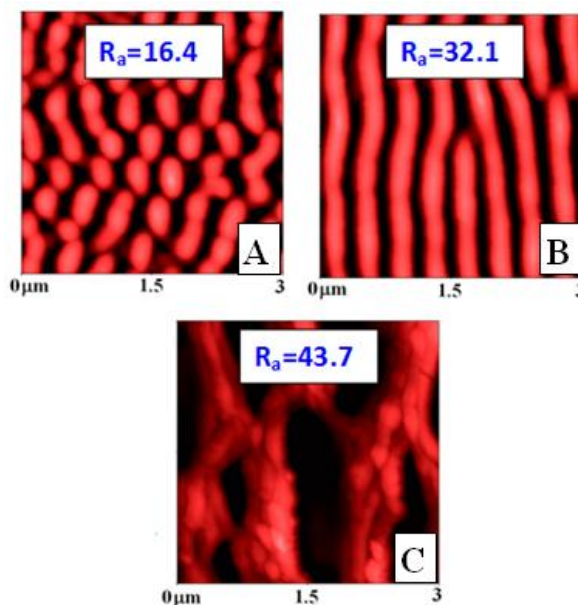
2Po23**PERIODICKÁ STRUKTURA NA POVRCHU PEN INDUKOVANÁ EXCIMEROVÝM LASEREM PŘI ÚHLU DOPADU 0 AŽ 45°**

P. Slepíčka*,¹, O. Neděla¹, N. Slepíčková Kasálková¹, Z. Kolská², V. Švorčík¹

¹Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko technologická v Praze, Technická 5, Praha 6, 166 28, petr.slepicka@vscht.cz

²Přírodovědecká fakulta, Univerzita Jana Evangelisty Purkyně, Ústí nad Labem, 400 96

Existuje několik druhů periodických povrchových struktur (např. bodové či liniové) indukovaných na povrchu polymeru. Nejčastěji připraveným periodickým vzorem je struktura, kde směr vlnek je rovnoběžný s hlavní polarizací laserového paprsku. Vzdálenost mezi jednotlivými vlnkami závisí na několika faktorech. Hlavním je vlnová délka aplikovaného laserového svazku, dále pak chemická struktura polymeru a úhel dopadu laserového paprsku. V této práci byly použity biaxiálně orientované PEN fólie o tloušťce 50 mikronů. Vzorky byly ozářeny KrF laserem s úhlem dopadu laserového svazku 0-45°. Vybrané vzorky polymeru byly rovněž ozářeny přes kontaktní masku. Drsnost povrchu a rozměry struktury (šířka a výška vlnek) byly měřeny pomocí mikroskopie atomárních sil. Koncentrace prvků na povrchu byla stanovena z ARXPS spekter. Bylo studováno rozhraní mezi ozářeným povrchem pod šterbinami a stíněným povrchem maskou. Byly stanoveny optimální vstupní parametry pro přípravu nanostruktury s vysokou periodicitou. Byl popsán vliv úhlu dopadu laserového paprsku na tvar vlnek a drsnost povrchu polymeru. Povrchová drsnost a šířka vlnek se zvětšuje s úhlem dopadu laserového paprsku. Ozařování laserem vede ke změnám v chemickém složení povrchové vrstvy PEN. Bylo zjištěno, že i v počáteční fázi tvorby periodické nanostruktury (nízký počet pulsů) se významně zvyšuje zastoupení kyslíku (karbonylové a karboxylové skupiny) na povrchu PEN.



Obr. 1 Povrchová morfologie (2D, 3x3 μm^2) PEN ozářeného KrF laserovým svazkem (laserový tok 6 (A), 10 (B) a 14 (C) mJcm^{-2} , úhel dopadu 45°). R_a představuje průměrnou povrchovou drsnost v nm.

Autoři děkují za finanční podporu grantu GAČR č. 13-06609S.

2Po24**VLIV ZLATÝCH NANOČÁSTIC A ZPŮSOBU JEJICH PŘÍPRAVY NA VLASTNOSTI PHB**

Nikola Slepíčková Kasálková¹, Petr Slepíčka¹, Petr Sajdl², Silvie Rimpelová³, Václav Švorčík¹

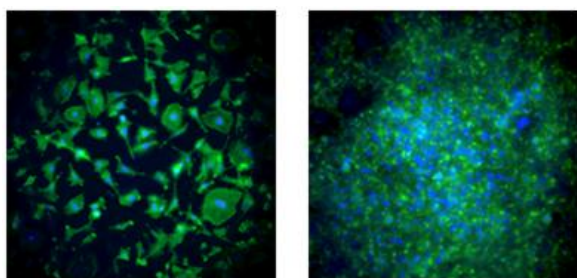
¹Ústav inženýrství pevných látek, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha, nikola.kasalkova@vscht.cz

²Ústav energetiky, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha

³Ústav biochemie a mikrobiologie, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha

Nanostrukturované polymery se jeví jako vhodné materiály s potencionálním uplatněním v tkáňovém inženýrství. Jedním ze způsobů, jak vytvořit nanostrukturovaný povrch s novými funkcemi, je navazování nanočástic na předem aktivovaný polymerní povrch. V této práci byl studován vliv přítomnosti zlatých nanočástic a způsobu jejich přípravy na vlastnosti biopolymerní folie (polyhydroxybutyrát s 8% polyhydroxyvalerátu). Experiment byl proveden v několika krocích. Nejdříve bylo nutno povrch polymerní folie aktivovat plasmatickým zářením a teprve poté byly na substrát navazovány

nanočástice zlata. Analýza povrchu modifikované polymerní folie byla provedena následujícími metodami. Elementární složení a struktura byla studována pomocí rentgenové fotoelektronové spektroskopie, povrchová morfologie a drsnost byla stanovena mikroskopií atomárních sil, změny v povrchové smáčivosti byly určeny goniometricky. Cytokompatibilita substrátů byla testována metodou *in vitro*. Bylo zjištěno, že plasmatická aktivace a následné navázání zlatých nanočástic vede ke změnám v morfologii povrchu, drsnosti a smáčivosti. Velikosti změn do značné míry závisí nejen parametrech modifikace ale i na způsobu přípravy nanočástic. Ten má také zásadní vliv na cytokompatibilitu substrátu.



Obr. 1 Buňky kultivované po dobu 6 (vlevo) a 72 hodin (vpravo) na substrátu s Au nanočásticemi.

Autoři děkují za finanční podporu projektu GAČR 08/12/G108.

2Po25

STUDIUM TVORBY POLYMORFŮ CaCO_3 BĚHEM KARBONATACE SUSPENZE NANOVÁPNA V ETHANOLU

Radek Ševčík¹, Marta Pérez-Estébanez¹, Petra Máčová¹

¹Ústav teoretické a aplikované mechaniky AV ČR, Centrum excellence Telč, Batelovská 485-486, 588 56 Telč, Česká republika, sevcik@itam.cas.cz

V památkové péči je kladen velký důraz na kompatibilitu aplikovaných prostředků se substrátem. V případě vápenných materiálů splňuje tuto podmínku vápenná voda, jejíž nevýhodou je nízká koncentrace $\text{Ca}(\text{OH})_2$ a tudíž nutnost mnohonásobné aplikace při konsolidačním zásahu. V nedávné době byly vyvinuty koloidní suspenze nanovápna, jež mají výhodu několikanásobně vyšší koncentrace. Efektivita ošetření těmito prostředky byla již testována [1].

Příspěvek se věnuje studiu karbonatce nanovápna a tvorbě polymorfů CaCO_3 během tohoto procesu. K tomuto tématu se dá dohledat pouze několik prací a to např. [2,3]. Nanovápnem

se rozumí suspenze $\text{Ca}(\text{OH})_2$ v alkoholu, v tomto případě v ethanolu (CaLoSil® E25). Karbonatační reakce suspenze nanovápna o koncentraci 25 g l^{-1} a objemu 5 ml byla studována v klimatické komoře při konstantních teplotních a vlhkostních podmínkách ($T = 20(1)^\circ\text{C}$, 65(5) RH). V pravidelných intervalech (7, 14, 21 a 28 dnů) byly vzorky analyzovány metodami infračervené spektrometrie (FTIR), rentgenové práškové difrakce (XRPD) a pozorovány pod skenovacím elektronovým mikroskopem (SEM). Kvantitativní stanovení bylo provedeno Rietveldovým vyhlazováním z XRPD dat. Bylo zjištěno, že vzorky obsahovaly 3 krystalické formy CaCO_3 a to kalcit, aragonit a vaterit, jejichž procentuální zastoupení bylo časově proměnné. Těchto výsledků bude využito v dalším výzkumu při aplikaci nanovápna na vápnité materiály.

Tato práce vznikla za podpory projektu GAČR 14-20374P a projektu č. LO1219 v rámci Národního programu udržitelnosti I MŠMT.

- [1] Z. Slížková, D. Frankeová, M. Drdácý: In J. J. Hughes, (ed.), The 3rd Historic mortars conference (2013); Z. Slížková, D. Frankeová: In J. Náprstek, C. Fisher, 21st International conference Engineering mechanics (2015)
- [2] P. López-Arce, L.S. Gómez-Villalba, S. Martínez-Ramírez, M. Álvarez de Buergo, R. Fort: Powder technology (2011)
- [3] L.S. Gomez-Villalba, P. López-Arce, R. Fort: Applied Physics A (2012)

2Po26

STUDIUM TUHÉ FRAKCE ATMOSFÉRICKÉHO AEROSOLU Z PLZNĚ POMOCÍ RENTGENOVÉ PRÁŠKOVÉ DIFRAKCE - ANEB VÍTE CO DÝCHÁTE?

Ondřej Vík^{1,2}, David Havlíček¹

¹ Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy v Praze, Albertov 6, 128 43 Praha

² Ústav anorganické chemie AV ČR, v.v.i., Husinec-Řež 1001, 250 68 Řež

V této práci bylo studováno pomocí práškové rentgenové difrakce metodou paralelního svazku mineralogické složení vzorků denních měření prachů z několika míst v Plzni. Získaná difrakční data byla porovnána s databází nejběžněji se vyskytujících složek atmosférického prachu. Tato databáze vznikla z publikovaných výsledků z podkrušnohorské oblasti [1] a na jejím základě byla provedena fázová analýza vzorků. Ve vzorcích byla elektronovým mikroskopem

vizuálně potvrzena vlákna amfibolového azbestu, který byl pomocí EDS analýzy určen na základě prvkového složení jako aktinolit. Dále byl porovnáním meteorologické situace v době odběru a analýzy možných zdrojů znečištění v Plzni popsán transport několika složek atmosférického aerosolu antropogenního původu.

- [1] PODHORNÁ, P. Zpracování výsledků identifikace mineralogického složení atmosférického prachu v různých výškách nad zemí na stanicích Kopisty u Mostu, Dlouhá Louka a Milešovka. Praha 2009. Bakalářská práce. Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie.

2Po27

VLIV TROJMOCNÝCH OXIDŮ NA STRUKTURU A VLASTNOSTI OLOVNATÝCH FOSFOREČNANOVÝCH SKEL

Maryna Vorokhta, Jan Chmelík, Petr Mošner, Ladislav Koudelka

Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, maryna.vorokhta@student.upce.cz

V rámci práce bylo studováno 9 olovnatých fosforečnanových skel, modifikovaných oxidem lanthanitým a yttritým, připravených ve dvou kompozičních řadách: (40-a)PbO-aLa₂O₃-60P₂O₅ (a=0-20 mol% La₂O₃, řada A) a (40-b)PbO-bY₂O₃-60P₂O₅ (b=0-15 mol% Y₂O₃, řada B). Skla byla syntetizována v Pt kelímku při teplotách 1050-1400°C. Syntézní teploty se zvyšovaly s rostoucím obsahem obou trojmocných oxidů. U připravených skel byla studována jejich struktura, termické chování a fyzikálně-chemické vlastnosti (měrná hmotnost, molární objem, chemická odolnost, index lomu).

Ze studia vlastností vyplynulo, že s rostoucím obsahem Y₂O₃ klesá měrná hmotnost skel, zatímco s rostoucím obsahem La₂O₃ jejich měrná hmotnost vzrůstá. Molární objem skel s přibývajícím obsahem oxidu lanthanitého a yttritého roste. Nejnížší chemická odolnost byla zjištěna u výchozího skla 40PbO-60P₂O₅.

Z DSC a TD křivek bylo zjištěno, že s obsahem La₂O₃ a Y₂O₃ vzrůstá teplota skelné transformace v rozmezí 255-541°C (A) resp. 299-491°C (B), což svědčí o nárůstu vazebných sil ve skelné struktuře, zatímco koeficient teplotní roztažnosti klesá. Všechna skla při zahřívání krystalizují v rozmezí ~290-700°C. Produktem krystalizace

jsou zejména metafosforečnanové a difosforečnanové krystalické fáze.

Struktura výchozího skla je tvořena zejména tetraedrickými jednotkami PO₄ typu Q² a Q¹. S rostoucím obsahem La₂O₃ a Y₂O₃ dochází k postupné depolymerizaci fosforečnanové strukturní sítě a nárůstu poměru Q¹/Q².

Práce vznikla za finanční podpory grantu MŠMT (SG 350004).

2Po28

SYNTÉZA NANOČÁSTIC NA BÁZI KVANTOVÝCH TEČEK

Marek Weinštuk¹, Stanislava Rybáková¹, Přemysl Lubal^{1,2}

¹*Ústav chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Kotlářská 2, CZ-611 37 Brno,*

²*Středoevropský technologický institut (CEITEC), Masarykova univerzita, Kamenice 5, CZ-625 00 Brno
mare.wein@seznam.cz*

Význam a využití různých nanomateriálů na bázi kvantových teček v poslední době roste ve fyzice, biologii, medicíně, materialových vědách, ale i v oblasti analytické chemie pro identifikaci a stanovení různých látek^{1,2}. Pro koloidní polovodičové částice na bázi kvantových teček (QDs), kdy se nejčastěji využívají málo rozpustné kadmátové sloučeniny obecného vzorce CdX (X = S, Se, Te), je jejich rozpustnost možné zvýšit pokrytím jejich povrchu, např. organickými látkami obsahujícími thiolovou skupinu.

Tento příspěvek se zabývá postupem syntézy CdTe kvantových teček, které jsou pokryty ligandy popsány v literatuře nebo nově testovanými. Připravené nanočástice pak byly charakterizovány fluorescenční, DLS a IČ spektroskopickými metodami a testovány z hlediska teplotní, časové a pH stability. V neposlední řadě byly zkušenosti s CdTe kvantovými tečkami aplikovány na syntézu CdSe a směsných Cd(Se/Te) kvantových teček, kde je proměnlivé molární zastoupení selenidových a telluridových iontů.

Tato práce vznikla za podpory grantů GA ČR 13-08336S a CEITEC.1.05/1.1.0/02.0068.

- [1] Hlaváček A., Skládal P.: Chem. Listy 105, 611 (2011)
[2] Zhang H., Wang D., Yang B.: J. Am. Chem. Soc. 128, 10171 (2006)

POSTERY - SEKCIA 3

ORGANICKÁ CHÉMIA A POLYMÉRY

3Po01

POLYPYRROLE NANOTUBES PREPARED AT VARIOUS CONCENTRATIONS OF METHYL ORANGE

Elizaveta Alekseeva¹, Jan Prokeš¹, Patrycja Bober²,
Miroslava Trchová², Jaroslav Stejskal²

¹ Charles University in Prague, Faculty of Mathematics and Physics, 180 00 Prague 8, Czech Republic; elizaveta_alekseeva@kmf.troja.mff.cuni.cz

² Institute of Macromolecular Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, 162 06 Prague 6, Czech Republic

The nanotubular form of polypyrrole (Fig. 1) is important because of its higher electrical conductivity and better mechanical properties compared to globular form. It is well known that morphology of polypyrrole nanotubes is influenced by structure-guiding template [1], methyl orange, and its concentration [2]. In present experiments polypyrrole nanotubes have been synthesized by the oxidation of pyrrole with iron(III) chloride hexahydrate in the presence of methyl orange. The concentration of methyl orange was varied in the range from 0 M to 0.0075 M, resulting in the maximum of conductivity of polypyrrole nanotubes at about 0.0025 M (Fig. 2).

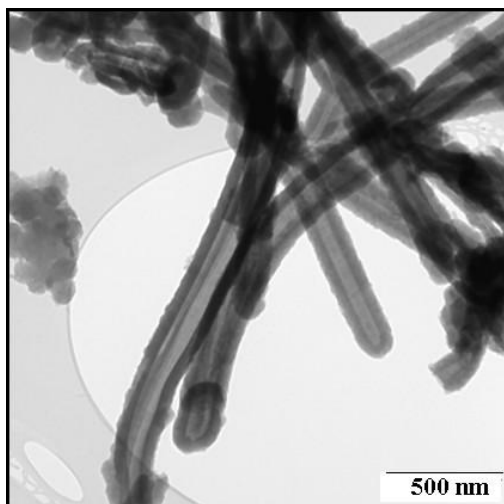


Fig. 1 Transmission electron micrograph of typical polypyrrole nanotubes.

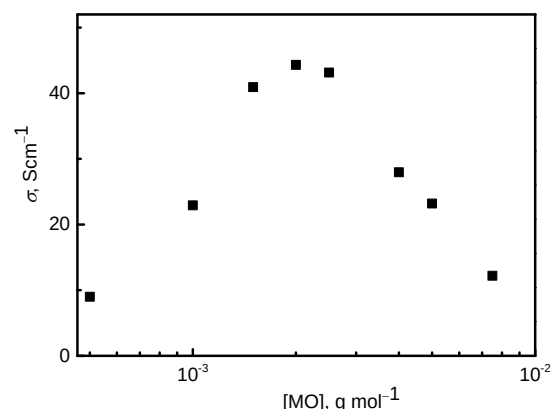


Fig. 2 Dependence of the conductivity, σ , of polypyrrole nanotubes on the molar concentration of methyl orange in the reaction mixture.

The conductivity of polypyrrole nanotubes compressed into pellets was studied by a four-point method in the van der Pauw arrangement. Temperature dependences of conductivity were measured in the temperature range 78–320 K. To understand transport mechanisms in polypyrrole nanotubes, several models were used: variable range hopping, fluctuation-induced tunneling, and charging-energy-limited tunneling. The best fit of the experimental data was achieved with the fluctuation-induced tunneling model.

Acknowledgements

The authors thank the Charles University in Prague (SVV-2015-260215) for financial support.

References

- [1] J. Kopecká, D. Kopecký, M. Vršata, P. Fitl, J. Stejskal, M. Trchová, P. Bober, Z. Morávková, J. Prokeš, and I. Sapurina, *RSC Adv.* 4 (2014) 1551–1558.
- [2] M. Joulazadeh and A. H. Navarchian, *Synth. Met.* 199 (2015) 37–44.

3Po02

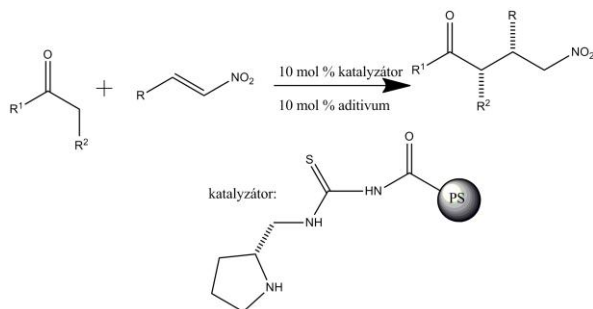
RECYKLOVATELNÉ ENANTIOSELEKTIVNÍ ORGANOKATALYZÁTORY PRO MICHAELOVY REAKCE ZALOŽENÉ NA IMOBILIZOVANÝCH ACYLTHIOMOČOVINÁCH

Ladislav Androvič^{*}, Pavel Drabina, Miloš Sedlák

Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Universita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, mail: ladislav.androvic@student.upce.cz

V posledních letech byly vyvinuty velmi účinné organokatalyzátory imobilizované na polystyrenu

(PS)¹. Botnavý perlový kopolymer styren/4-vinylbenzoové kyseliny síťovaný tetra(etylen-glykol)-bis(4-vinylbenzyl)etherem byl použit jako nosič k zakotvení (2S)-pyrrolidin-2-ylmethyl thiomocoviny. Účinnost připraveného organokatalyzátoru byla ověřena pro enantioselektivní Michaelovu reakci² ketonů se substituovanými nitroalkeny (Schéma). Reakce byla testována v různých rozpouštědlech, při rozdílných teplotách a s přidávkou aditiv.



Michaelova reakce katalyzována tímto katalyzátorem poskytovala produkt ve vysokých konverzích (77-99%) s velmi dobrou diastereoselektivitou (až 96 : 4 *syn* : *anti*) a vynikající enantioselektivitou (60-99%). Tyto výsledky byly srovnatelné s původním homogenním organokatalyzátorem. Volba botnavého kopolymeru jako nosiče výrazně zjednodušila proces izolace produktu a umožnila znovupoužití a recyklaci katalyzátoru.

- [1] E. Alza, X. C. Cambeiro, C. Jimeno, M. A. Pericas, *Org. Lett.*, **2007**, 3717-3120
 [2] S. Ban, X. Zhu, Z. Zhang, H. Xie, Q. Li, *Eur. J. Org. Chem.* **2013**, 2977-2980

3Po03 STUDIUM CHEMISORPCE BUTYLAMINŮ NA POVRCH Ni-, Co- A Cu-KATALYZÁTORŮ

Dana Bílková¹, Jiří Krupka¹, Jakub Havlík¹

¹Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha, Dana.Bilkova@vscht.cz

Práce byla zaměřena na studium chemisorpce butylaminů na povrch kovových hydrogenačních katalyzátorů. K tomuto účelu byla využita metoda teplotně-programované desorpce (TPD) v prostředí helia. Studovanými katalyzátory byly Co/SiO₂, Ni/SiO₂ a Cu/SiO₂. Výsledky byly porovnávány s předchozími měřeními na katalyzátorech Pt/SiO₂ a Pd/SiO₂ [1].

Bylo zjištěno, že množství butylaminu chemisorbovaného na povrch kovu je shodné, bez ohledu na zvolený katalyzátor. TPD butylaminu, dibutylaminu a tributylaminu z povrchu Co-katalyzátoru ukázaly, že jak z hlediska

chemisorbovaného množství aminu, tak z hlediska síly sorpce aminu vyjádřené teplotním maximem desorpčního píku, se kobalt chová stejně jako platina. To je překvapivé zjištění vzhledem k rozdílným katalytickým vlastnostem obou kovů v hydrogenačních procesech poskytujících aminy.

Dále bylo zjištěno, že množství butylaminu chemisorbovaného na povrch čerstvého Co-katalyzátoru je o cca 15 % vyšší než na stejný katalyzátor již jednou vystavený expozici aminu a jeho následné desorpci. Tento experimentální fakt byl v předkládané práci diskutován.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č.20/2015).

- [1] Dana Bílková, Barbora Ďuričová, Jiří Krupka: Study of mechanism of amines conversion on hydrogenation catalyst surfaces by temperature-programmed desorption. Presented at 12th Pannonian Symposium on Catalysis, Třešť; September 16 to 20, (2014)

3Po04 SPECTRAL STUDY OF INTERACTIONS OF PYRENE BASED PROBES IN POLYMER MATRICES

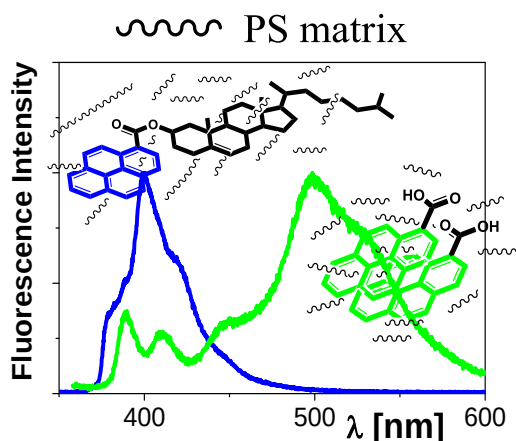
Martin Danko¹, Peter Kasák¹, Pavol Hrdlovič¹

¹Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, Slovak Republic
²Center for Advanced Materials, Qatar University, P.O.Box 2713, Doha, Qatar

Pyrene and its various derivatives are fluorophores of choice to monitor various microscopic properties because of these derivatives exhibit the strong dependence of their vibrational structure on polarity and the long lifetimes in non-polar media (ca 200-400 ns). They possess the ability to form homo- and hetero-dimers in the excited state (excimers, exciplexes) [1,2]. If these probes have more complex structure, aggregation might complicate, but sometime also facilitate their application as a probe to characterize the interaction in the solutions, micelles and in the solid phase.

Two pyrene derivatives with cholesterol moiety as esters were synthesized and their spectral properties were compared with the mono-substituted pyrene derivatives and the parent pyrene in toluene and doped in glassy polymer matrices of polystyrene, poly(methylmethacrylate) and polyvinylchloride in the concentration range of 0.002–0.06 mol kg⁻¹.

Detailed fluorescence spectral analysis, mainly the shape of the static fluorescence spectra, confirmed the better compatibility and lower pyrene self-aggregation of the pyrene-cholesterol probes compared with the other pyrene derivatives in polymer matrices. The fluorescence spectra allow us to at least qualitatively estimate the extent of the interactions between the components and to judge the relative polarities of the polymer matrices and the low molecular weight compounds [3].



The authors greatly appreciate the financial support provided by the Slovak Research and Development Agency under contract no. APVV-0291-11 and Slovak grant agency VEGA for project 2/0112/13.

- [1] F.M. Winnik, Chem. Rev. 93 (1993) 587–614.
- [2] F. Ito, T. Kakiuchi, T. Sakano, T. Nagamura, Phys. Chem. Chem. Phys. 12 (36) (2010) 10923–10927.
- [3] M. Danko, P. Kasák, P. Hrdlovič, J. Photochem. Photobiol. A Chem., 307 (2015) 79–87.

3Po05

PRÍPRAVA A OPTIMALIZÁCIA VLASTNOSTÍ POLYMÉRNÝCH GÉLOV, URČOVANIE ŠTRUKTÚRY LÁTOK PROSTREDNÍCTVOM REZIDUÁLNYCH DIPÓLOVO-DIPÓLOVÝCH INTERAKCIÍ

Jana Doháňošová, Michal Šoral, Tibor Liptaj

Oddelenie NMR spektroskopie a hmotnostnej spektrometrie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, jana.dohanosova@stuba.sk

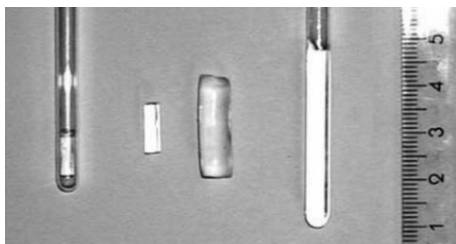
NMR spektroskopia je všeobecne považovaná za jednu z kľúčových metód riešenia štruktúry látok. Štruktúrne informácie sa v NMR získavajú prostredníctvom spektrálnych parametrov (chemický posun, multipletová štruktúra, hodnoty

priamych a nepriamych interakčných konštánt). Ich okamžitá hodnota závisí od orientácie molekuly a jej fragmentov v magnetickom poli, pri rýchlej zmene orientácie molekúl sa však pozorujú iba ich štatisticky spriemerované hodnoty.

Veľkosť dipólovo-dipólovej interakcie dvojice spinov i a j (D_{ij}) závisí od orientácie spojnice interagujúcich spinov k vektoru magnetickej indukcie B_0 . Hodnota D_{ij} teda umožňuje určovať smer orientácie tejto spojnice resp. vzájomnú relatívnu konfiguráciu medzi absolútne ľubovoľnými dvojicami spinov [1]. V izotropnom prostredí (v roztoku) sa dipólovo-dipólové interakcie v dôsledku rýchlych pohybov v molekule spriemerujú na nulu, čo na jednej strane značným spôsobom zjednodušuje spektrá (prejavuje sa iba nepriama J_{ij} interakcia), na druhej strane sa však znižuje ich informačný obsah.

V orientovanom prostredí závisí prejav dipólovo-dipólovej interakcie od smeru a stupňa orientácie, v spektrách sa pozorujú tzv. **reziduálne dipólovo-dipólové interakcie (RDC)**. Pri vysokom stupni orientácie veľkosť RDC $\langle D_{ij} \rangle$ presahuje rozdiely v chemických posunoch a vznikajú extrémne komplikované spektrá vyššieho poriadku, ktoré sa prakticky nedajú využiť. Pri nízkom stupni orientácie ($\sim 0,1\%$) sa $\langle D_{ij} \rangle$ prejaví ako príspevok k nepriamej J_{ij} interakcii medzi tou istou dvojicou spinov. Táto štruktúrna informácia je informáciou nového typu, ktorú dosiaľ nebolo možné zo spektier vysokého rozlíšenia získať.

S objavom nových orientujúcich médií na báze bicíel [2] nastal koncom 90. rokov veľký rozmach v aplikácii RDC pri riešení štruktúr proteínov a ďalších vodorozpustných látok. Avšak naďalej pretrvával nedostatok médií zabezpečujúcich dostatočne nízky stupeň orientácie vzorky pre malé, vo vode nerozpustné organické molekuly. Pre tento účel boli s odstupom času vyvinuté špeciálne média, tzv. zosieťované polymérne gély (Obr. 1) [3].



Obr. 1 Zľava: časť tyčinky zosieťovaného polystyrénu v NMR kyvete; polymérna tyčinka mimo NMR kyvety; polymérna tyčinka po napučaní (= polymérny gél) bez obmedzenia; polymérna tyčinka po napučaní s obmedzením v NMR kyvete. [3a]

Výber a príprava médií pre uniformnú parciálnu orientáciu molekúl v NMR kyvete je jednou z kľúčových podmienok pre úspešné využitie RDC v štruktúrnej analýze látok. S cieľom implementovať túto novú NMR metodiku na Slovensku sa študovali niektoré už popísané typy polymérnych gélov.

Autori by v rámci projektu VEGA 1/0770/15 radi poďakovali za finančnú podporu Vedeckej grantovej agentúre MŠVVaŠ SR a SAV.

- [1] Kramer, F.; Deshmukh, M. V.; Kessler, H.; Glaser, S. J. *Concept. Magn. Reson. A* **2004**, 21A, 10-21.
- [2] Tjandra, N.; Bax, A. *Science* **1997**, 278, 1111-1114.
- [3] (a) Luy, B.; Kobzar, K.; Kessler, H. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2004**, 43, 1092-1094. (b) Thiele, C. *Eur. J. Org. Chem.* **2008**, 5673-5685. (c) Kummerlöwe, G.; Luy, B. *Trends Anal. Chem.* **2009**, 28, 483-493. (d) Gayathri, C.; Tsarevsky, N. V., Gil, R. R. *Chem. Eur. J.* **2010**, 16, 3622-3626.

3Po06

PŘÍPRAVA NOVÝCH GLYKOKLASTRŮ ZA VYUŽITÍ Pd-KATALYZOVANÉ REAKCE

Lenka Erhartová¹, Kamil Parkan¹

¹ Ústav chemie přírodních látek, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika erhartol@vscht.cz

Interakce sacharid-lektin hraje významnou roli v různých biologických procesech, jako je buněčná komunikace, virové a bakteriální infekce, rakovinné bujení a záněty. V přírodě se nejčastěji uplatňuje tzv. multivalentní efekt prostřednictvím polyvalentních interakcí s více kopiemi sacharidových epitopů s lektiny. Nicméně přesný mechanismus účinku těchto glykokonjugátů není dosud zcela znám. Jako

vhodné látky pro přípravu glykokonjugátů se ukazují calix[4]areny a porfyriny. [1]

V naší práci jsme se prozatím zaměřily na přípravu jednoduchých glykoklastrů vázaných přímo C-C vazbou na calix[4]arenové nebo porfyrinové jádro za využití nového originálního Pd-katalyzovaného přístupu.

Tato práce byla podpořena Grantovou agenturou České republiky (grant č. 15-17572S)

- [1] Galante, E.; Geraci, C.; Campo, V.; Carvalho, I.; Sesti-Cosa, R. *Tetrahedron* **2011**, 67, 5902-5912.

3Po07

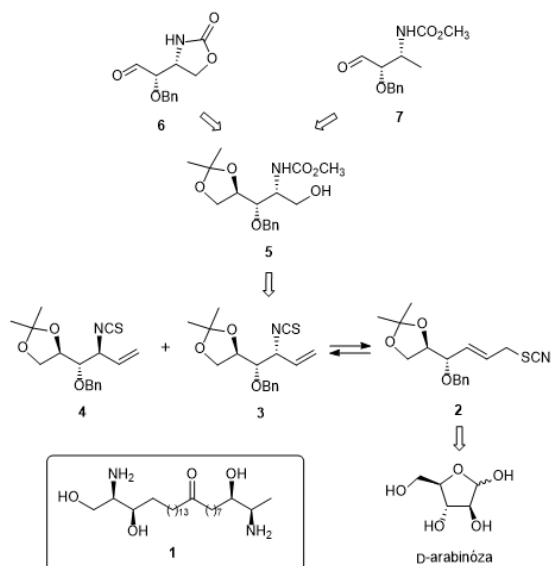
STEREOSELEKTÍVNÁ SYNTÉZA POLÁRNÝCH ČASTÍ RHIZOCHALÍNU C

Milica Fabišíková¹, Miroslava Martinková¹, Jozef Gonda¹

¹Katedra organickej chémie, Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta UPJŠ, Moyzesova 11, 04001 Košice, milicafabisikova@gmail.com

Sfingoidné bázy predstavujú základné štruktúrne jednotky biologicky významných molekúl sfingolipidov, ktoré sa okrem stavebnej funkcie podieľajú aj na viacerých bunkových procesoch (komunikácia buniek, diferenciácia, apoptóza). V prírode je známy veľký počet sfingoidných báz izolovaných z veľkého počtu organizmov (cicavce, morské organizmy, rastliny, huby, kvasinky), pričom práve sfingozíny izolované z mikróbov a bezstavovcov (morské riasy, hubky) vykazujú širokú stereochemickú heterogenitu.¹ Rhizochalinín C **1**, izolovaný z morskej hubky *Rhizochalina incrustata* je predstaviteľom skupiny α,ω -bifunkcionalizovaných sfingoidných báz. Jeho štruktúra pozostáva z dvoch polárnych častí s L-treo konfiguráciou prepojených lipililným reťazcom.²

Cieľom syntézy bolo využitie D-arabínózy ako chirálneho substrátu pre syntézu aminoalkoholových fragmentov **6** a **7**, rhizochalinínu C. D-Arabínóza bola modifikovaná na tiokyanát **2** a realizáciou *aza*-Claisenovho prešmyku u **2** bolo do molekuly implementované nové stereogénne centrum nesúce maskovanú aminoskupinu. Transformáciou produktu prešmyku, izotiokyanátu **3**, sa získal zodpovedajúci alkohol **5**, ktorý pomocou vzájomnej premeny funkčných skupín poskytne potrebné segmenty **6** a **7** cieľovej molekuly **1**.



Obr. 1. Retrosyntetická stratégia prípravy zlúčenín **6** a **7**.

Tento príspevok vznikol s podporou projektov: VEGA 1/0168/15, VEGA 1/0398/14 a VVGS -2014-172

- [1] Ko, J.; Molinski, T. F. J. Org. Chem. 2013, 78, 498-505.
 [2] Pruett, S. T.; Bushnev, A.; Hagedon, K.; Adiga, M.; Haynes, CH. A.; Sullards, M.C.; Litta, D. C.; Merrill, A. H. J. Lipid. Res. 2008, 49, 1621-1639.

3Po08

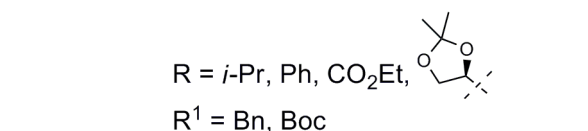
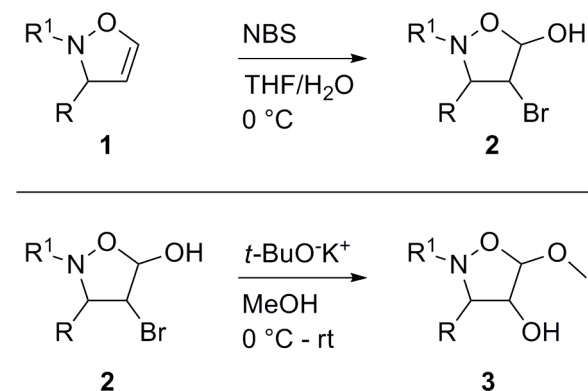
UNUSUAL BEHAVIOR OF THE 4-BROMISOXAZOLIDIN-5-OLS IN REACTIONS WITH ALKOXIDES

Róbert Fischer¹, Viera Rolíncová¹, Lívia Dikošová¹, Zuzana Vývleková¹, Radka Štadániová¹, Ondrej Záborský¹

¹Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava, Slovak Republic, robert.fischer@stuba.sk

Small five-membered heterocycles are still in focus of organic chemists due to their versatile synthetic applications. They often play an important role as key building blocks, for instance in medicinal chemistry in the processes of screening for potent pharmacological candidates. Recently, we developed a method for the preparation of 4,5-unsubstituted 2,3-dihydroisoxazoles **1** [1] and successfully applied them in dihydroxylation and hydroxybromination reactions [2]. Obtained 4-bromosubstituted isoxazolidin-ols **2** represent a new type of isoxazolidines, which were synthesized by us for the first time. Herein, we report on an unusual behavior of such compounds in reactions with alkoxides, resulting in 5-alkoxysubstituted

isoxazolidin-4-ols **3** [3]. Diastereoselectivity of hydroxybromination reactions as well as a proposal mechanism of alkoxide mediated transformations of 4-bromoisoxazolidin-5-ols will be presented.



R = *i*-Pr, Ph, CO₂Et,

R¹ = Bn, Boc

This work was supported by Slovak Grant Agencies (APVV, Bratislava, project No. APVV-14-0147; VEGA, Bratislava project No. 1/0488/14 and ASFEU, Bratislava, ITMS projects No. 26240120001, 26240120025).

- [1] Róbert Fischer, Daniela Lackovičová, Lubor Fišera: Synthesis 44, 3783 (2012).
 [2] Daniela Beňadiková, Júlia Čurillová, Tomáš Lacek, Erik Rakovský, Ján Moncol, Jana Doháňošová, Róbert Fischer: Tetrahedron 70, 5585 (2014).
 [3] Róbert Fischer, Boris Stanko, Nadežda Prónayová: Synlett 24, 2132 (2013).

3Po09

SYNTÉZA SUBSTITUOVANÝCH 1-(FENYLKARBAMOYL)NAFTALEN-2-YL ALKYLKARBAMÁTŮ S POTENCIÁLNÍ ANTIMYKOBAKTERIÁLNÍ AKTIVITOU

Tomáš Goněc¹, Josef Stráník¹, Jiří Kos¹, Michal Oravec², Josef Jampílek¹

¹Ústav chemických léčiv, Farmaceutická fakulta, VFU Brno, Palackého 1, 612 42 Brno, tgonec@vfu.cz

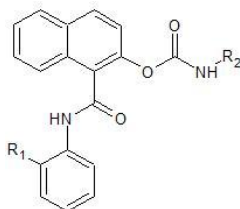
²Czech Globe, Centrum výzkumu globální změny AV ČR, Bělidla 4, 986/4a, 603 00 Brno

Na následky tuberkulózy (TBC) v současnosti umírá dva milióny lidí ročně a celá jedna třetina světové populace je nakažena její latentní formou. Samotné onemocnění vyvolané bakteriemi rodu Mycobacterium tak představuje globální hrozbu. Pro rychle rostoucí počet multirezistentních (MDR) kmenů, latentních forem TBC nebo smrtelných kombinací HIV s mykobakteriálními

infekcemi je nutné hledat nové léky a nové racionální postupy léčby [1].

V poslední době byly na ÚCHL FAF VFU Brno syntetizovány série hydroxynaftalen-karboxanilidů, z nichž některé sloučeniny vykazaly slibnou antimykobakteriální aktivitu [2]. U sérií modelových nedávno syntetizovaných salicylanilidů došlo k výraznému nárůstu antimykobakteriální aktivity substitucí hydroxyly alkylkarbamátovým uskupením [3]. Proto bylo připraveno 16 nových derivátů zahrnujících tento strukturní fragment (obr. 1). R₁: -CF₃, -NO₂; R₂: ethyl – oktyl, isopropyl.

Syntéza probíhala ve dvou krocích. V prvním kroku reaguje kyselina 2-hydroxynaftalen-1-karboxylová a substituovaný anilin v přítomnosti chloridu fosforitého v prostředí chlorbenzenu a působení mikrovlnného záření za vzniku příslušného karboxanilidu. Ve druhém kroku reaguje 2-hydroxynaftalen-1-karboxanilid s příslušným isokyanátem za katalýzy triethylaminem. Reakce probíhá při laboratorní teplotě v prostředí acetonitrilu. Připravené sloučeniny byly přečištěny rekrystalizací ze směsi ethylacetát/ethanol nebo sloupcovou chromatografií. Struktura látek byla ověřena spektrálními metodami (NMR, IR, HRMS) a jejich čistota chromatograficky - TLC, HPLC. V současné době probíhá testování jejich biologické aktivity.



Obr. 1 Substituované 1-

(fenylnkarbamoyl)naftalen-2-yl alkylkarbamáty

Projekt vznikl s podporou grantu IGA VFU 320/2015/FAF. HPLC spojené s LTQ Orbitrap XL HRMS je součástí Národní infrastruktury CzeCos/ICOS (LM2010007)

- [1] WHO – Tuberculosis. <http://www.who.int/tb/en/> (13.1.2015).
- [2] Gonč, T. et al. Molecules 18 (2013) 9397-9419
- [3] Ferriz, J.M. et al. Bioorg. Med. Chem. 18 (2010) 1054-1064

3Po10 BIOPOLYMERS PRODUCED BY FRESHWATER MICROALGAE

Michal Halaj^a, Peter Capek^a, Vladimír Cepák^b,
Jaroslav Lukávský^b, Pavel Příbyl^b

^aInstitute of Chemistry, Center for glycomics, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, Bratislava, Slovakia, chemhami@savba.sk

^b Centre for Algology and Biorefinery Research Centre of Competence, Institute of Botany, Academy of Sciences of the Czech Republic, Třeboň, Czech Republic

Microalgae are the lowest plant organisms and are spread in all environments of the Earth. It is assumed that their annual biomass production is higher than that of higher plants. This phenomenon makes microalgae good candidates for the production of 3rd generation biofuels [1]. Microalgae are involved in a variety of applications, e.g. in wastewater treatment and cosmetics, they increase the nutritional value of food and animal feed, are a source of vitamins, minerals, proteins and highly valuable polyunsaturated oils that are added to infant formulas and various supplements, the pigments are important as natural dyes, etc. [2]. As microalgae are the first photosynthetic organisms on the Earth, they are responsible for early production of oxygen in the atmosphere, and currently represent around 50% of the global productivity of the primary photosynthesis [3]. A significant feature of microalgae is their ability to excrete into the environment metabolites, e.g. toxins or viscous polymers which can be utilized in food and pharmaceutical industries.

The aim of this study is to investigate the physico-chemical profile of *Dictyosphaerium* biopolymers. The chemical and spectroscopic analyses, ion-exchanged and gel permeation chromatographies showed a proteoglycan nature of biopolymers characterized by a high molecular mass and a wide range of monosaccharide composition.

Study was supported by the VEGA grant no. 2/0018/15 and the APVV grant nos. 0305/12 and 0125/11, and by the Technology Agency of the Czech Republic (projects TE01020080 and TA03011027) and a long-term research development projects no. RVO 67985939.

- [1] A. L. Ahmad et al.: Renew. Sust. Energ., Reviv., (2011)
- [2] Pauline Spolaore, et al.: J. biosci. Bioeng., (2006)
- [3] Mario Giordano, John Beardall, John A. Raven: Annu. Rev. Plant Biol., (2005)

3Po11**ORGANIC GEOCHEMISTRY OF CZECH AMBER**

Martina Havelcová¹, Ivana Sýkorová¹, Vladimír Machovič¹, Karel Mach², Zdeněk Dvořák²

¹*Institute of Rock Structure and Mechanics, Academy of Science of the Czech Republic, V Holešovičkách 41, Prague 8, 182 09, Czech Republic, havelcova@irsm.cas.cz*

²*Severočeské doly, a.s., Doly Bílina, ul. 5.května 213, 418 29, Bílina, Czech Republic*

A collection of amber of various age (99,6 - 5,33 Ma) from localities in the Czech Republic was investigated. To arrive at detailed description of the samples, the content of organic macerals, composition of biomarkers, and differences in infrared spectra have been determined. There were differences among amber samples that could be attributed to their botanical origin, deposition, age and maturity, however, the analyses clearly indicated that all amber samples lacked succinic acid and differ from the known Baltic amber. Five amber samples of the Cenomanian age (99,6 - 93,5 Ma) have consistent fingerprints that point to their identical or very similar plant source. The fingerprint of amber of Eocene age (55 Ma–34 Ma) is close to the Cenomanian samples, suggesting also a similar plant source. The Oligocene (33,9 Ma - 23 Ma) and Miocene (23 Ma - 5,33 Ma) amber samples differ most significantly from the other ones, however the presence of labdane type diterpenoids, sesquiterpenoid cedrane, abietane and pimarane diterpenoids, and the absence of plant triterpenoids in all amber samples point to a coniferous source. According to the chemical composition of the studied Czech amber samples, their source plants can be assigned exclusively to the Cupressaceae family.

The study was financially supported by Severočeské doly, a.s. and by the Czech Science Foundation (Research Grant No. 13-18482S).

3Po12**DESIGN SYNTÉZY s-TRIAZINŮ S NOVÝMI PIPERAZINOVÝMI STRUKTURNÍMI MOTIVY A JEHO REALIZACE S VYUŽITÍM METOD „ZELENÉ CHEMIE“**

Eva Havráňková^{1,2}, Jozef Csöllei², Pavel Pazdera¹

¹ *Ústav chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova Univerzita, UKB, Kamenice 753/5, CZ-625 00 Brno, Česká republika, pazdera@chemi.muni.cz*

² *Ústav chemie léčiv, Farmaceutická fakulta VFU Brno, Palackého 1-3, 612 42 Brno, Česká republika.*

V několika posledních letech se s-triazinový strukturní motiv jako nosič farmakoforů stává předmětem studia řady výzkumných týmů. Deriváty s-triazinů vykazují široké spektrum biologických aktivit, přičemž v současné době jsou v popředí zájmu zejména jejich anti-bakteriální, anti-tuberkulózní a anti-rakovinové vlastnosti. [1] U derivátů s těmito vlastnostmi se pak často vyskytují strukturní motivy typu substituovaných piperazinových, substituovaných pyridinových a dalších dusíkatých heterocyklických kruhů. [2]

Využití metody přípravy 1-monosubstituovaných piperazinů prostřednictvím přímé substituce na piperazinu (za kontrolovaných podmínek) a za katalýzy imobilizovanými kovy [3] umožňuje elegantní syntézu širokého spektra nových 1-mono-substituovaných piperazinových derivátů a jejich zavedení do struktury s-triazinů.

Cílové piperazinové a další strukturní fragmenty byly zaváděny na s-triazinový skelet *per partes* prostřednictvím přítomné alifatické primární či sekundární aminoskupiny substitucí atomů chloru ve snadno dostupném 2,4,6-trichloro-1,3,5-triazinu. První krok, to je nejreaktivnější stupeň substituce atomu chloru v 2,4,6-trichloro-1,3,5-triazinu, byl proveden cestou nukleofilní aromatické substituce (adičně-eliminační proces eventuálně katalyzovaný) dva substituční kroky cestou oxidativní adice – heterogenní adice - reduktivní eliminace (Buchwaldův-Hartwigův C-N coupling/ Ullmannova syntéza katalyzovaná imobilizovanými ionty/komplexy Cu(I)).

V příspěvku bude demonstrován jak design syntézy 1,3,5-triazinů s novými piperazinovými strukturními motivy, tak i jeho realizace s využitím metod „zelené chemie“.

[1] Kumar, R.; Singh, A. D.; Singh, J.; Singh, H.; Roy, R. K.; Chaudhary, A.; 1,2,3-Triazine Scaffold as a Potent Biologically Active Moiety:

A Mini Review. Mini-Reviews in Medicinal Chemistry, 2014, 14, 72-83.

- [2] Shah, D. R.; Modh, R. P.; Chikhalia, K. H.; Privileged s-triazines: Structure and Pharmacological Applications. Future Med. Chem., 2014, 6 (4), 463-477.
- [3] Herová, D.; Pazdera, P.; Efficient Solid Support Catalyzed Mono Aza-Michael Addition Reactions of Piperazine, Monatshefte für Chemie - Chemical Monthly [online]. 2014, vol. 146, issue 4, s. 653-661 [cit. 2015-05-18]. DOI: 10.1007/s00706-014-1379-2.

3Po13

BIODECORATED QUANTUM DOTS AND THEIR CONJUGATES.

Ignác Capek^{a,c)}, Peter Capek^{b)}, Zuzana Hloušková^{c)}

Polymer Institute^{a)}, Institute of Chemistry^{b)}, Slovak Academy of Sciences, Bratislava and Faculty of Industrial Technologies, TnUni, Púchov, Slovakia

Quantum dots for biomedical applications have advanced rapidly in recent years because of their excellent optical properties. Compared to fluorescent dyes, QDs do not suffer the setback of photobleaching and their emission colors are tunable from the visible to the NIR region by varying the size or composition of QDs. QDs nanoparticles with diameters of approximately 10–50 nm have been shown to be particularly effective at entering cells. This size range places the particles in the colloidal or nanoparticle domain, which encompasses gold nanoparticles, semiconductor quantum dots and viruses. Such nanoparticles are comparable in size to the components of cells and to characteristic biological lengthscales, making the subnanoparticles a good starting point for designing therapeutic vectors. Some composite-based QDs might strongly interact with electromagnetic fields, which can thus be used to image and control the distribution of the nanoparticles in biological media. The different material properties mean that it is necessary to screen the interface of the nanoparticles from the surrounding biological media to confer biocompatibility and avoid cytotoxicity. Hybrid approaches, in which QDs are coupled to DNA aptamers and proteins, augment the desirable optical properties of the inorganic nanoparticles with improved cell-entering properties. The subnanometer QDs might be encapsulated inside proteins and DNA, so forming a new type of biosensors. The challenge that we face in the future involves the development of “smart”

contrast agents that are capable of monitoring specific cellular and molecular events in vivo. This approach is focused on the development of versatile multifunctional (super)paramagnetic nanoparticles for multimodal imaging in a number of clinical pathologies such as early cancer diagnosis and cellular trafficking in stem cell therapy and immunological interventions. By conjugating multiple components such as fluorescent QDs or dyes, tumor-targeting groups, anticancer drugs, or RNA to the composite-based QDs, future work would seek to provide solutions to early cancer diagnosis and the targeted delivery of therapeutics.

Acknowledgements: Study was supported by APVV-0125/11 and VEGA-2/0040/14 projects.

3Po14

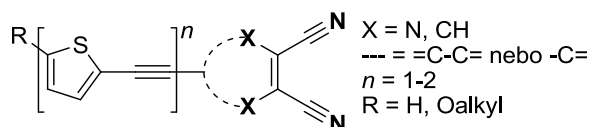
VÝVOJ NOVÝCH FOTOREDOX KATALYZÁTORŮ

Zuzana Hloušková,¹ 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 dnešní době je z pohledu „zelené“ chemie preferována minimální spotřeba energie. Z tohoto hlediska upoutala pozornost fotoredoxní katalýza, která využívá světlo jako přirozený zdroj energie. Katalyzátory absorbující viditelné světlo, které jsou schopny přeměnit solární na chemickou energii, hrají velmi důležitou roli ve fotokatalytických reakcích. V současnosti je hledán fotoredox katalyzátor schopný univerzálně, efektivně a v malém množství katalyzovat širokou paletu fotoredox reakcí. V minulých letech 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 [1]. V takovémto organickém push-pull chromoforu dochází k vnitřnímu přenosu náboje (ICT), který je odpovědný za fundamentální vlastnosti chromoforu. Z ICT vycházející fotofyzikální vlastnosti jako jsou absorpční maximum, molární absorpční koeficient a redoxní potenciál lze velice efektivně modulovat změnou struktury chromoforu [2]. V současné době jsou prováděny strukturální modifikace nedávno vyvinutého 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-2,3-dikarbonitril, benzen-1,2-dikarbonitril nebo 1-methyl-1*H*-imidazol-4,5-dikarbonitril) a rovněž změnou délky a složení π -konjugované cesty (2,5-thienyl v kombinaci s násobnými vazbami). Jako donor elektronů byla využita methoxy skupina. Obrázek 1 zobrazuje obecnou strukturu nově vyvíjených fotoredox katalyzátorů ve tvaru písmene X nebo Y (Obr. 1). V příspěvku budou diskutovány především syntetické cesty vedoucí k těmto sloučeninám.



Obr. 1 Obecná struktura vyvíjených push-pull fotoredox katalyzátorů.

Tato práce byla podpořena Technologickou agenturou České republiky (TE01020022, Flexprint).

- [1] Y. Zhao, C. Zhang, K. F. Chin, O. Pytela, G. Wei, H. Liu, F. Bureš, Z. Jiang: *RSC Advances* **2014**, 4, 30062.
[2] F. Bureš: *RSC Advances* **2014**, 4, 58826.

3Po15 SYNTÉZA MAKROINICIÁTOROV A PRÍPRAVA DIBLOKOVÝCH KOPOLYMÉROV

Ľudmila Hrčková, Jozef Kollár, Štefan Chmela, Eva Macová, Alena Šišková, Dušan Berek

Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, Slovensko, upollud@savba.sk

Kontrolovaná tzv. „živá“ radikálová polymerizácia regulovaná stabilnými nitroxidmi resp. alkoxyamínmi umožňuje jednoduchú prípravu dobre definovaných homopolymérov s cieľovou architektúrou a vlastnosťami, ktoré môžu byť použité ako makroiniciátory pre syntézu blokových kopolymérov. Doteraz bolo všeobecne akceptované, že rozsah „živosti“ procesu je vysoký pre všetky konverzie. Pri radikálovej polymerizácii styrénu a akrylátov je však možná aj termická iniciácia. Bežne používané deriváty 2,2,6,6-tetrametylpiperidínu (TEMPO) nie sú schopné účinne regulovať polymerizácie akrylátov. Preto sme sa zamerali na prípravu alkoxyamínov, ktoré sú štruktúrne podobné s najmodernejšími regulátormi kontrolovanej polymerizácie styrénu a akrylátov na báze 2,2,5-trimetyl-4-fenyl-3-azahexán-3-nitroxidu (TIPNO) alebo 2-{N-terc-butyl-N-[1-(diethoxy-fosforyl)-

2,2-dimetyl-propyl]-aminooxy}- metylesteru kyseliny propionovej (SG1-MA). Optimalizáciou podmienok reakcie ako teplota polymerizačnej reakcie, reakčný čas, koncentrácia regulátora sa pripravili polyméry s pomerne úzkou distribúciou mólových hmotností. Tieto polyméry sa použili ako makroiniciátory pri postpolymerizácii s iným monomérom pre prípravu diblokových kopolymérov. Pripravené makroiniciátory i kopolyméry boli charakterizované pomocou GPC a IČ spektroskopie a zastúpenie homopolymérov v produktoch kopolymerizácie bolo analyzované aj kvapalinovou chromatografiou pri limitných podmienkach desorpcie (LC LCD)[1].

- [1] Tento výskum bol podporený Vedeckou Grantovou Agentúrou Ministerstva školstva, vedy, výskumu a športu
[2] Slovenskej republiky a Slovenskej akadémie vied (projekt č. 2/0167/14 a č. 2-0142-14).
[3]
[4] Dušan Berek, Eva Macová: *Journal of Separation Science*, 2015, 38, 543-549.

3Po16 EXPANDING THE SCOPE OF MO(VI)- CATALYZED TRANSFORMATIONS OF CARBOHYDRATES

Zuzana Hricoviniová

Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, 845 38 Bratislava, Slovakia, Zuzana.Hricoviniova@savba.sk

The important role of carbohydrates in biology and medicine stimulated the development of syntheses for new functional structures. Interactions of carbohydrates with metal ions have been extensively studied and their applications were used for preparations of biologically active compounds as well as for large-scale preparation of pharmaceuticals.

The Mo(VI)-catalyzed isomerization of reducing sugars in microwave field allows an efficient access towards epimeric or isomeric structures. This contribution gives an overview on Mo(VI)-catalyzed transformations of various mono- and polysaccharides into enantiopure compounds, rare sugars and fine chemicals. The methodology was successfully used for the preparation of many sugar derivatives and led to the efficient preparation of epimeric aldoses, deoxy-aldoses, 2-C- and 3-C-branched aldoses, 6-O-derivatives or disaccharides. An important extension of this methodology is the Mo(VI)-catalyzed transformation of polysaccharides in MW field

[1-2]. Transformations proceed with high stereoselectivity, in a simple way, and without the formation of undesirable side-products. Moreover, this catalytic approach offers interesting alternative for transformation of renewable carbohydrate biomass, as promising source of organic raw materials, for production of useful chemical intermediates.

The emphasis is primarily placed on excellent stereoselectivity, utilizing the synergic effect of Mo(VI) and MW field. Examples on application of Mo(VI)-catalyst will be discussed and the latest results of our experimental work will be presented.

- [1] Zuzana Hricovíniová, In *Polysaccharides: Bioactivity and Biotechnology*, K.G. Ramawat, J.M. Mérillon, Springer Reference, (2014) 1-45
 [2] Zuzana Hricovíniová, *Carbohydrate Polymers*, 98 (2013) 1416– 1421

3Po17

SYNTEZA CYKlickÝCH SLOUČENIN ZA VYUŽITÍ ORGANOKATALÝZY A KATALÝZY KOMPLEXY PŘECHODNÝCH KOVŮ

David Hurný^{1,2}, Marek Remeš¹, Jan Veselý¹

¹Katedra organické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Hlavova 8, 128 43 Praha 2

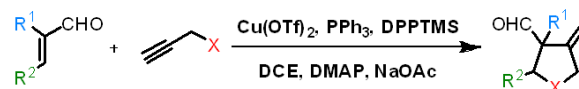
²Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Hlavova 8, 128 43 Praha 2, david.hurny@natur.cuni.cz

Výzkum nových efektivních reakcí, které umožňují přípravu komplexních molekul ze snadno dostupných výchozích látek je stále trvajícím cílem řady vědeckých pracovišť. Naše pracoviště se v nedávné době zabývalo možností spojení organokatalýzy a katalýzy přechodnými kovy v karbocyklizačních reakcích, jež by vedly k 5 členným heterocyklickým sloučeninám za současné tvorby chirálního kvartérního centra.

V příspěvku bude diskutováno spojení využití chirálních aminokatalyzátorů (primárních a sekundárních) pro aktivaci aldehydové skupiny v kombinaci s katalýzou Cu¹⁺ ionty na aktivaci terminálních alkynů. Naše pozornost byla věnována nalezení podmínek pro „one-pot“ provedení karbocyklizační reakce, stereoelektronickým vlivům katalyzátoru, ligandů a báze na enantiosektivitu a výtěžek reakce. V neposlední řadě byl také zkoumán rozsah použití této reakce na různých derivátech výchozího aldehydu a také s několika deriváty

nesoucí propargylovou jednotku (C-nukleofily, N-nukleofily nebo O-nukleofily).

Nejlepší enantiomerní přebytky produktů karbocyklizační reakce se pohybovaly kolem 94 % ee a izolované výtěžky okolo 50 %.



Obr. 1 Karbocyklizační reakce ve „one-pot“ provedení

The authors gratefully acknowledge financial support from the Charles University Grant Agency (project No 704213).

- [1] Montaignac, B.; Ostlund, V.; Vitale, M. R.; Ratovelomanana-Vidal, V.; Michelet, V. *Org. Biomol. Chem.*, **2012**, 10, 2300.
 [2] Praveen, C.; Montaignac, B.; Vitale, M. R.; Ratovelomanana-Vidal, V.; Michelet, V. *ChemCatChem*, **2013**, 5, 2395.

3Po18

DEGRADÁCIA CELULÓZY A JEJ DERIVÁTOV

Ivica Janigová, Jozef Rychlý, Katarína Csomorová, Lyda Rychlá

Ústav polymérov Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 841 45 Bratislava, Ivica.Janigova@savba.sk

Predložená práca je zameraná na štúdium degradácie celulózy a jej derivátov metyl-(MC), etyl-(EC), hydroxyetyl-(HEC) a nitro-(NC) termoanalytickými metódami: DSC, TGA a chemiluminiscencie (CHL). Porovnávali sa výsledky získané z meraní v inertnej a oxidačnej atmosfére. CHL monitoruje exotermické reakcie prebiehajúce počas degradácie ako disproportionácia sekundárnych peroxylových radikálov a terminácia alkylových radikálov [1], čím prispieva ku komplexnejšiemu poznaniu degradačných procesov. Pri CHL dochádza k tvorbe excitovaných foriem ako je tripletová karbonylová skupina a singletový molekulový kyslík. Relaxácia excitovaných stavov do základného stavu je sprevádzaná emisiou svetla, ktorá tak súvisí s tvorbou iniciačných miest, ktoré vznikajú vďaka degradačným faktorom (kyslík, zvýšená teplota, UV žiarenie).

DSC krivka C je charakterizovaná výrazným endotermickým píkum pyrolytického rozkladu [2]. MC a EC vykazujú pozvoľnejší charakter degradačnej krivky, ktorý v počiatočnom štádiu reprezentuje depolymerizáciu s následným

pyrolytickým rozkladom. Výraznejší posun k nižším teplotám sa zaznamenal pri HEC, čo je spôsobené prítomnosťou hydroxyetyl skupiny, ktorá znižuje teplotu pyrolýzy a podporuje karbonizáciu, čo sa na TGA záznamoch prejavilo najväčším zvyškom. Podľa predpokladov najnižšia stabilita sa zaznamenala pri NC. Rozklad začína odštiepením kyseliny dusičnej a pokračuje rozkladom celulóзовého skeletu. Nízka teplota rozkladu je spôsobená nízkou väzbovou energiou CO-NO₂ väzby [3]. Výsledky získané z TGA meraní (hodnoty teplôt z DTG pík) v inertnej atmosfére korelujú s DSC analýzou.

Prítomnosť kyslíka spôsobuje posun DSC a DTG pík smerom k nižším hodnotám pre všetky vzorky okrem NC. Je to spôsobené prítomnosťou NO₂ skupiny a ňou iniciovaných oxidačných reakcií. Výsledky z DSC a TGA meraní opäť navzájom korelujú. Chemiluminiscenčné merania potvrdili výsledky získané klasickými metódami termickj analýzy. Stabilita celulózy a jej derivátov v prítomnosti kyslíka klesá v poradí C>MC>EC>HEC>NC.

Táto práca vznikla s podporou Vedeckej grantovej agentúry MŠ SR a SAV Grant VEGA No.2/0122/15.

- [1] M. Pleteníková, L. Matisová-Rychlá, J. Rychlý, I. Lacík: Carbohydrate Polym. **69**, 57 (2007)
- [2] Xin-Gui Li, Mei-Rong Huang, He Bai: J. Appl. Polym. Sci., **73**, 2977 (1999).
- [3] M. Sućeska, M. Rajić: Energetics materials/Niehaus, Michael-Karlsruhe:Fraunhofer ICT, 2002.

3Po19 SESKVITERPENOVÉ LAKTONY Z LASERPITIUM ARCHANGELICA

Michal Jurášek¹, Miloš Majdl¹, Pavla Tomanová²,
Silvie Rimpelová¹, Vladimíra Pavlíčková¹, Eva
Kmoníčková³, Tomáš Ruml¹, Juraj Harmatha², Pavel
B. Drašar¹

¹Ústav chemie prírodných látok, VŠCHT Praha,
Technická 5, Praha 6, CZ-166 28

²Ústav organickej chemie a biochemie AV ČR,
Flemingovo náměstí 542/2, Praha 6, CZ-16000 Praha,
Technická 5, Praha 6, CZ-166 28

³Univerzita Karlova, LF v Plzni a Ústav
experimentální medicíny AV ČR, Praha 4, CZ-142 20

Sesquiterpenové laktony (SL) jsou velmi zajímavou skupinou přírodních organických látek. Tyto metabolity rostlin jsou v popředí zájmu chemiků a biochemiků zejména díky jejich farmakologickým vlastnostem. Příspěvek shrnuje

naše dosavadní výsledky týkající se dvou SL, trilobolidu (Tb) a archangelolidu (Ag). Tyto SL nejsou komerčně dostupné, proto byla v naší skupině vyvinuta metoda izolace ze semen *Laserpitium archangelica*, Wulfen. Obě látky se vyznačují, co se týče imunobiologických charakteristik, protichůdnými účinky. Trilobolid je imunomodulační agens s výraznými schopnostmi vyvolat v buňce produkci NO, naopak, Ag působí imunostimulačně. Vysoká toxicita trilobolidu naznačuje, že stejně jako komerčně dostupný SL thapsigargin, působí jako ireverzibilní inhibitor SERCA proteinu. V naší skupině byla doposud připravena řada látek odvozených především od Tb, přičemž některé z nich si zachovaly parametry svých aktivit ve vztahu k Tb.

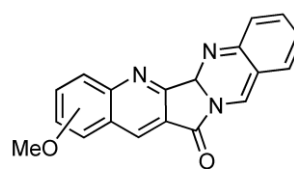
Tato práce byla podpořena granty GACR 303/14/04329-S a MSMT 20/2015.

3Po20 KARBONYLÁCIA S [Fe(CO)₅] V SYNTÉZE INHIBÍTOROV TOPOIZOMERÁZY

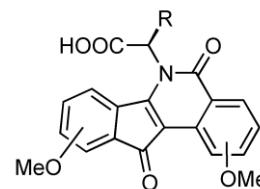
Matej Babjak¹, Tibor Gracza¹, Beáta Kandriková¹,
Jakub Ondriaš¹, Diana Pogányová¹, Patrik Šurab¹,
Lucia Veselovská¹

¹Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU
v Bratislave, Radlinského 9, 812 34 Bratislava,
matej.babjak@stuba.sk, beakandrik@gmail.com

Topoizomerázy sú unikátne DNA hydrolázy/ligázy, uvoľňujúce torzné napätie v DNA helixe vytvorené rozpletaním reťazca v procese transkripcie, čím zamedzujú vytvoreniu superhelikálnej terciárnej štruktúry DNA. Táto činnosť je pre život bunky esenciálna a jej znefunkčnenie vedie k apoptóze. Všetky zlúčeniny, ktoré majú schopnosť vytvárať s topoizomerázami a DNA stabilné komplexy a tak inhibovať ich činnosť, majú antiproliferačné účinky a je možné ich používať ako kancerostatiká a antibiotiká.



luotoníny A



indénoizochinolín

Na našom pracovisku sme vyvinuli homogénnu modifikáciu Heckovej karbonylácie [1], založenú na využití [Fe(CO)₅] ako karbonylačného činidla a následne sme túto metodiku využili v syntéze

dvoch tried inhibítorov topoizomerázy TopI. Navrhnuté syntézy derivatizovaných luotonínov A [2] a aminokyselinou substituovaných indénoizochinolínov [3] predstavujú najkratšie známe syntézy týchto zlúčenín a výhľadovo umožňujú syntézu mnohých derivátov v podmienkach automatizovanej paralelnej syntézy.

Tento výskum je financovaný z vedeckých grantov VEGA 1/0488/14, APVV-0203-10 a APVV-14-0147.

- [1] Babjak, M.; Markovič, M.; Kandriková, B.; Gracza, T. *Synthesis* **2014**, 46, 809-816; Babjak, M.; Caletková, O.; Ďurišová, D.; Gracza, T. *Synlett* **2014**, 25, 2579 - 2584.
- [2] Liang, J. L.; Cha, H. Ch.; Jahng, Y. *Molecules*, **2011**, 16, 4861 - 4883.
- [3] Pommier, Y.; Cushman, M. *Mol. Cancer Ther.* **2009**, 8, 1008 - 1010.

3Po21

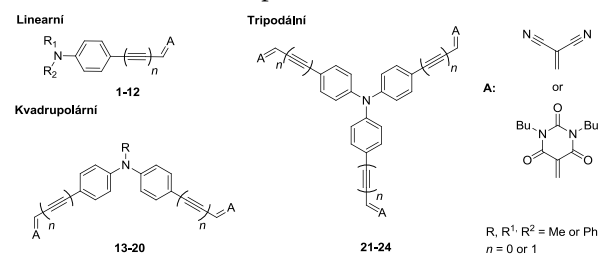
PUSH-PULL CHROMOFORY S LINEÁRNÍM, KVADRUPOLOÁRNÍM A TRIPODÁLNÍM STRUKTURNÍM USPOŘÁDÁNÍM

Milan Klikar,¹ Filip Bureš¹

¹Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika, milan.klikar@upce.cz

Push-pull chromofory si v několika posledních dekádách vydobily pevnou pozici v mnoha oblastech chemie a materiálové fyziky a dnes patří již mezi tradiční a velmi populární materiály především v optoelektronice a telekomunikačních zařízeních. Díky jejich barevnosti, polarizovatelnosti, výborným lineárním a nelineárním optickým vlastnostem a polo-vodičovému charakteru se již push-pull chromofory běžně využívají nejen v organické optice a elektronice (2PA, OPVC, OLED, DSSC, BHJSC, OFET,...), ale i jako fluorescenční a solvatochromní sondy a fotoredoxní katalyzátory. Rovněž nacházejí stále větší uplatnění i v biologických odvětvích. V roce 2013 byla v pracovní skupině doc. Bureše ověřena na sérii molekul vysoká akceptorní schopnost *N,N'*-dibutylbarbiturové jednotky. [1] Později byla touto skupinou připravena série tripodálních molukul s centrálním donorním trifenylaminem a akceptorními kyano skupinami. [2] Proto byla následně provedena rozsáhlá studie porovnávací vliv strukturního větvení od prostého lineárního přes kvadрупolární až k tripodálnímu uspořádání chromoforů na jejich

především optické vlastnosti a rovněž posouzen i vliv zvolené akceptorní jednotky (*N,N'*-dibutylbarbiturová vs. dikyanovinyllová) na jejich chování. Z tohoto důvodu byla připravena série 24 molekul se systematicky rostoucím typem strukturního větvení a měnící se délkou π -konjugovaného systému se dvěma typy akceptorních jednotek (Obr. 1). Jejich struktura a čistota byla ověřena pomocí ¹H a ¹³C NMR spektroskopie, MALDI spektrometrie, IČ spektroskopie a elementární analýzou. V příspěvku bude diskutována nejen jejich příprava, ale zejména vyvozeny vztahy „struktura vs. vlastnosti“. Konkrétně tedy vliv strukturního větvení, délky π -konjugovaného linkeru a typ použité akceptorní jednotky na elektrochemické chování, tím ovlivnění HOMO a LUMO hladin a porovnání těchto výsledků se závěry z výpočetních metod. Dále budou diskutovány naměřená UV/Vis absorpční spektra, termální chování pomocí DSC analýzy a pravděpodobně i dvoufotonová absorpce.



Obr. 1 Push-pull chromofory s lineárním, kvadрупolárním a tripodálním strukturním uspořádáním.

Tato práce byla podpořena Grantovou agenturou České republiky (13-01061S).

- [1] M. Klikar, F. Bureš, O. Pytela, T. Mikysek, Z. Padělková, A. Barsella, K. Dorkenoo, S. Achelle: *New. J. Chem.* **2013**, 37, 4230 – 4240.
- [2] D. Dvejn, E. Michail, I. Polyzos, N. Almonasy, O. Pytela, M. Klikar, T. Mikysek, V. Giannetas, M. Fakis, F. Bureš: *J. Mater. Chem. C* **2015**, zasláno.

3Po22 RING-SUBSTITUTED 8-HYDROXYQUINOLINE-2-CARBOXANILIDES AS POTENTIAL ANTICUBERCULAR AGENTS

Jiří Kos^{1,*}, Tomáš Goněč¹, Eoghan Nevin², Aidan Coffey², Josef Jampilek¹

¹ Department of Chemical Drugs, Faculty of Pharmacy, University of Veterinary and Pharmaceutical Sciences, Palackého 1/3, 612 42 Brno, Czech Republic

² Department of Biological Sciences, Cork Institute of Technology, Bishopstown, Cork, Ireland

* Corresponding author: E-mail: kosj@vfu.cz

Tuberculosis (TB), caused by *Mycobacterium tuberculosis*, remains one of the world's deadliest communicable diseases. In 2013, an estimated 9.0 million people developed TB and 1.5 million died from the disease. Multidrug-resistant TB strains (MDR-TB) are a great worldwide problem. Drug resistance surveillance data indicate that in 2013 approximately 480 000 people developed MDR-TB worldwide. Extensively drug-resistant TB (XDR-TB) has been identified in 100 countries globally in 2013, and the average proportion of MDR-TB cases with XDR-TB was 9.0%. The emergence of MDR- and XDR-TB makes the discovery of new molecular scaffolds a priority to achieve effective control of TB [1,2].

In this study, a series of twenty-two ring-substituted 8-hydroxyquinoline-2-carboxanilides was prepared and characterized. Primary *in vitro* screening of the synthesized compounds was performed against *Mycobacterium tuberculosis* H37Ra ATCC 25177. Some of the tested compounds showed the antimycobacterial activity comparable with or higher than that of rifampicin. 8-Hydroxy-*N*-[3-(trifluoromethyl)phenyl]- and 8-hydroxy-*N*-[4-(trifluoromethyl)phenyl]quinoline-2-carboxamide showed MIC = 24 µM against all tested mycobacterial strains. A significant decrease of mycobacterial cell metabolism (viability of *M. tuberculosis* H37Ra) was observed using MTT assay. Screening of cytotoxicity of the compounds was performed using the THP-1 cells, and no significant lethal effect was observed. The structure-activity relationships are discussed.

This study was supported by the IGA VFU Brno 304/2015/FaF, 320/2015/FaF, 322/2015/FaF, 37/2014/FaF and by the Irish Department of Agriculture Fisheries and Food (FIRM): Refs 08RDCIT601 & 08RDCIT617.

[1] WHO – Global tuberculosis report. URL http://www.who.int/tb/publications/global_report/en/ [cit 2015-01-05]

[2] Koul, A.; et al. Nature 469 (2011) 483

3Po23 SYNTEZA A BIOLOGICKÁ AKTIVITA PEPTIDOVÝCH KONJUGÁTŮ ANTIMYKOBAKTERIÁLNÍCH SALICYLANILIDŮ

Martin Krátký¹, Szilvia Bösze², Zsuzsa Baranyai², Jarmila Vinšová¹

¹ Univerzita Karlova v Praze, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, martin.kratky@faf.cuni.cz

² MTA-ELTE Research Group of Peptide Chemistry, Pázmány Péter Sétány 1/A, P.O. Box 32, 1518 Budapest 112, Maďarsko

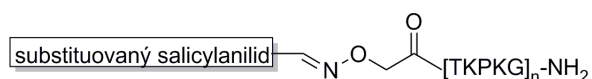
Tuberkulóza (TB) je infekční mykobakteriální onemocnění. Třetina světové populace je nakažena latentní TB, která může přejít do otevřené formy. Kvůli šíření rezistentních kmenů i koincidenci s HIV představuje TB vážný celosvětový problém – proto je vývoj nových antituberkulotik jednou z priorit WHO [1].

Námi připravené salicylanilidy vykazují antimykobakteriální aktivitu s komplexním mechanismem účinku. Jejich nevýhodou je nízká selektivita a biodostupnost [1,2]. Tyto problémy lze překonat navázáním na vhodný nosič za vzniku specifického drug delivery systému. Jako nosiče jsme zvolili oligopeptidy na bázi tuftsinu, které jsou netoxické, mají imunostimulační a chemotaktickou aktivitu. Specificky „cílí“ do makrofágů [3], čímž dochází k cílenému transportu za zvýšení aktivity a snížení toxicity.

Pilotně jsme připravili salicylanilidy nesoucí formylovou skupinu a jejich estery s 4-formylbenzoovou kyselinou. Peptidové nosiče byly syntetizovány step by step na pevné fázi, *N*-konec peptidu byl derivatizován Boc-aminoxyoctovou kyselinou. Po odštěpení z pryskyřice a purifikaci byly peptidy v roztoku konjugovány s formylovanými salicylanilidy za vzniku oximové vazby (obr. 1).

Získané kongujáty byly charakterizovány a biologicky hodnoceny. Vykazují výraznou *in vitro* extracelulární aktivitu vůči *M. tuberculosis* (včetně rezistentních kmenů) a *M. abscessus*, nadto jsou účinné i v modelu intracelulární TB (infikované makrofágy). Cytotoxické a

cytostatické vlastnosti výchozích salicylanilidů jsou naopak sníženy.



Obr. 1 Obecná struktura připravených konjugátů

Tato práce vznikla za podpory grantu IGA NT 13346 (2012).

- [1] Martin Krátký, Szilvia Bösze, Zsuzsa Baranyai, Ildikó Szabó, Jiřina Stolaříková, Georgios Paraskevopoulos, Jarmila Vinšová: *Bioorg. Med. Chem.*, (2015)
- [2] Martin Krátký, Jarmila Vinšová: *Curr. Pharm. Des.*, (2011)
- [3] Kata Horvati, Gabor Mezo, Nora Szabo, Ferenc Hudecz, Szilvia Bösze: *J. Pept. Sci.*, (2009)

3Po24

CONJUGATED KINASE INHIBITORS FOR TARGETED TRANSPORT INTO CANCER CELLS

Tomáš Gucký¹, Vladimír Kryštof²

¹ Laboratoř růstových regulátorů & Oddělení chemické biologie a genetiky, Centrum regionu Haná pro biotechnologický a zemědělský výzkum, Univerzita Palackého v Olomouci, Šlechtitelů 27, 78371 Olomouc
² Ústav experimentální botaniky, v.v.i., Laboratoř růstových regulátorů, Šlechtitelů 27, 78371 Olomouc
 vladimir.krystof@upol.cz

The cyclin-dependent kinases (CDKs) are specific serine/threonine protein kinases which play a key role in the regulation of cell cycle. Cancer cells often deregulate CDKs and therefore these enzymes are promising targets of novel anticancer drugs. To date, more than 20 inhibitors have been registered for clinical trials in cancer patients [1]. With palbociclib as the only one recent exception, no other has been approved yet, largely due to their undesired side effects and unfavorable pharmacological properties. One of the most serious problems of traditional chemotherapy of cancer diseases is the little or no specificity to cancer cells which leads to systemic toxicity. This can be substantially reduced by targeted drug delivery. The selective transport into cancer cells can be realized with the use of conjugates of cytotoxic agent and cancer recognition moiety. The cancer targeting delivery systems based on monoclonal antibodies, polyunsaturated fatty acids, polyamines, folic acid, hyaluronic acid and peptides have been intensively studied. We recently prepared single-digit nanomolar inhibitors of CDKs derived from roscovitine and confirmed their strong anticancer

activity *in vitro* and *in vivo* [2,3]. In order to minimize their toxicity, we have designed conjugates of certain roscovitine-derived inhibitors with polyamines and folic acid.

Tento projekt je podpořen Grantovou agenturou ČR (15-15264S).

- [1] Kryštof V, Uldrijan S. *Curr Drug Targets*. 11:291-302 (2010).
- [2] Gucký T, Jorda R, Zatloukal M, et al. *J Med Chem*. 56:6234-47 (2013).
- [3] Haider C, Grubinger M, Řezníčková E, et al. *Mol Cancer Ther*. 12:1947-57 (2013).

3Po25

POLYMERNÍ KONJUGÁT ZÁŘIČE AUGEROVÝCH ELEKTRONŮ PRO VÍCESTUPŇOVOU CÍLENOU TERAPII NÁDORŮ

J. Kučka¹, J. Mattová², O. Sedláček¹, M. Zadinová², P. Poučková², M. Hrubý¹

¹Ústav makromolekulární chemie AV ČR v.v.i., Praha

²Ústav biofyziky a informatiky, 1.LF UK v Praze

Radioaktivní rozpad některých radionuklidů je doprovázen emisí tzv. Augerových elektronů. Jejich dosah v biologickém prostředí je velmi krátký (několik nanometrů) a biologická účinnost nepatrná - pokud neinteragují s DNA v jádře buňky. Toho lze dosáhnout pomocí interkalátoru nesoucího vhodný radionuklid. Poškození molekuly DNA vede k zániku buňky a zároveň může být využito i primární záření z rozpadu pro simultánní zobrazování (tzv. theranostika).

Pro tuto studii byl vybrán jako zářič Augerových elektronů radionuklid ¹²⁵I navázaný na interkalátor ellipticin. Cílené akumulace značeného ellipticinu v nádoru bylo dosaženo navázáním hydrolyticky labilní vazbou na polymerní nosič s ověřeným EPR efektem (enhanced permeation and retention). Použitá hydrazonová vazba interkalátoru na polymer je v nádorovém prostředí s nižším pH řádově méně stabilní než v prostředí krve (pH= 7.4).

In vitro experimenty prokázaly účinnou internalizaci polymerního konjugátu nádorovými buňkami s následným uvolňováním značeného ellipticinu. Biodistribuční studie *in vivo* potvrdili mnohem výraznější akumulaci radioaktivity v nádoru ve srovnání s volným ¹²⁵I-ellipticinem v několika časových intervalech. Biodistribuce byla stanovena u laboratorních Balb/c myši s aktivitou zářiče 2 MBq/myš. Polymerní konjugát rovněž výrazně prodloužil dobu přežívání myši s nádorem.

Závěr:

Navrhaný systém může být účinným terapeutickým prostředkem. Možnost řízení uvolňování ellipticinu z polymeru zároveň snižuje radiační zátěž zdravých tkání.

Autoři děkují za finanční podporu Ministerstvu Průmyslu a obchodu České republiky (grant č. FR-TI4/625).

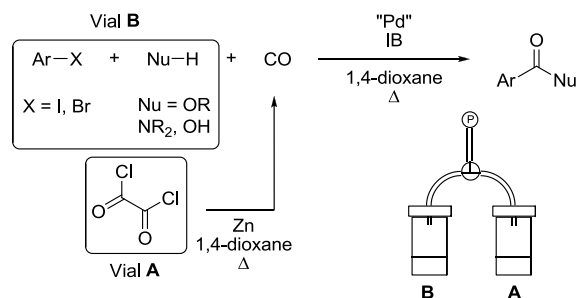
3Po26

OXALYL CHLORIDE AS EX-SITU DONOR OF CARBON MONOXIDE IN CARBONYLATION REACTIONS

Martin Markovič¹, Pavol Lopatka¹, Peter Koós¹, Tibor Gracza¹

¹*Institute 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. Furthermore, this group constitutes a unique handle, which can be transformed into a wide system of versatile functional groups by synthetic organic chemists. Installation of carbon monoxide from different sources into organic molecules is therefore an important field of research with broad applicability and impact [1]. On the other hand, transition metal catalyzed carbonylative cross-coupling reactions [2], which constitute many different compounds with carbonyl group, need carbon monoxide as the main reagent. However, this gas is highly toxic, invisible, tasteless and odorless what is principal reluctance to work with it. Herein, oxalyl chloride is introduced as competent and versatile carbonyl source in carbonylation chemistry. *Ex-situ* generated carbon monoxide from an oxalyl chloride is used in number of palladium-catalyzed carbonylative reactions in our two chamber system. The carbonylation reactions using this reagent are safe, easily feasible and more efficiently because of a near-stoichiometric amount of carbon monoxide.



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] a) Tsumoru Morimoto, Kiyomi Kakiuchi: *Angew. Chem. Int. Ed.* 43, 5580 (2004); b) Lipeng Wu, Qiang Liu, Ralf Jackstell, Matthias Beller: *Angew. Chem. Int. Ed.* 53, 6310 (2014).
- [2] a) Anne Brennfürer, Helfried Neumann, Matthias Beller: *Angew. Chem. Int. Ed.* 48, 4114 (2009); b) Qiang Liu, Hua Zhang, Aiwen Lei: *Angew. Chem. Int. Ed.* 50, 10788 (2011); c) Xiao-Feng Wu, Helfried Neumann, Matthias Beller: *Chem. Rev.* 113, 1 (2013); d) Xiao-Feng Wu, Xianjie Fang, Lipeng Wu, Ralf Jackstell, Helfried Neumann, Matthias Beller: *Acc. Chem. Res.* 47, 1041 (2014).

3Po27

SYNTHESIS AND UTILIZATION OF NOVEL NITRONE AND BICYCLIC ISOXAZOLIDINES AS PRECURSORS OF PYRROLIZIDINES

Tomáš Malatinský¹, Mária Spišáková¹, Róbert Fischer¹

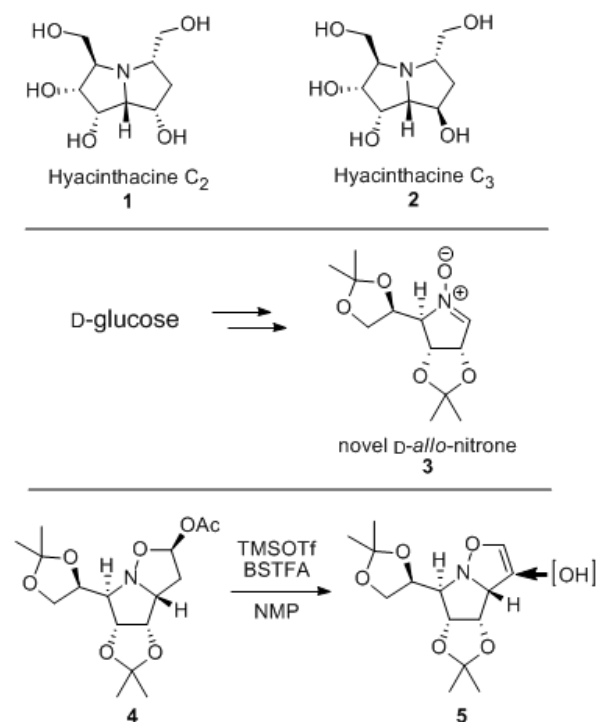
¹*Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, tomas.malatinsky@gmail.com*

Polyhydroxylated pyrrolizidine alkaloids are an important class of naturally occurring aminosugars that possess significant biological activity as inhibitors of glycosidases [1]. Recently, we reported on a novel synthetic strategy towards C5-hydroxymethyl-substituted pyrrolizidines [2], related with hyacinthacines C₂ (1) and C₃ (2) [3], based on 1,3-dipolar cycloaddition of five-membered D-talo-nitrone with vinylacetate, which proceeds surprisingly with excellent 3a,4-syn-selectivity.

In order to achieve a configuration of above mentioned natural alkaloids, we synthesized a new nitrone 3 in 10 steps from D-glucose in 13% total yield and examined its stereochemical

behavior in 1,3-dipolar cycloadditions with various dipolarophiles.

Selected bicyclic acetoxyisoxazolidine **4** was subjected to elimination with TMSOTf in the presence of BSTFA to form C-2/C-3 double bond suitable for the insertion of hydroxyl group into C-3 position. Synthesis of nitron **3**, stereochemical outcome of 1,3-dipolar cycloadditions as well as the results of elimination and the additions of hydroxylating agents 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] Robert J. Nash, Atsushi Kato, Chu-Yi Yu, George W. J. Fleet: *J. Future Med. Chem.* 3, 1513 (2011).
- [2] Daniela Beňadiková, Michal Medvecký, Alexandra Filipová, Ján Moncol, Milan Gembický, Nadežda Prónayová, Róbert Fischer: *Synlett* 25, 1616 (2014).
- [3] Atsushi Kato, Naoko Kato, Isao Adachi, Jackie Hollinshead, George W. J. Fleet, Chinami Kuriyama, Kyoko Ikeda, Naoki Asano, Rober J. Nash: *J. Nat. Prod.* 70, 993 (2007).

3Po28

FRUSTRATED LEWIS PAIRS-ASSISTED REDUCTION OF CARBONYL COMPOUNDS

Aleš Marek^{1,2}, Martin H. F. Pedersen²

¹ Institute of Organic Chemistry and Biochemistry Academy of Sciences of the Czech Republic, v.v.i., Flemingovo nám. 2, Prague 6, 16610, Czech Republic, marek@uochb.cas.cz

² Technical University of Denmark, Center for Nuclear Technologies, DTU Nutech / Hevesy Laboratory, Frederiksborgvej 399, Building 202, Roskilde 4000, Denmark

An alternative and robust method for the reduction of carbonyl groups by frustrated Lewis pairs (FLPs) will be discussed. With its very mild reaction conditions, good to excellent yields, absolute regioselectivity and the non-metallic character of the reagent, it provides an excellent tool for ¹H, ²H as well as ³H chemistry. It is a new strategy for the one-pot synthesis of alcohols selectively labeled with heavy isotopes of hydrogen.

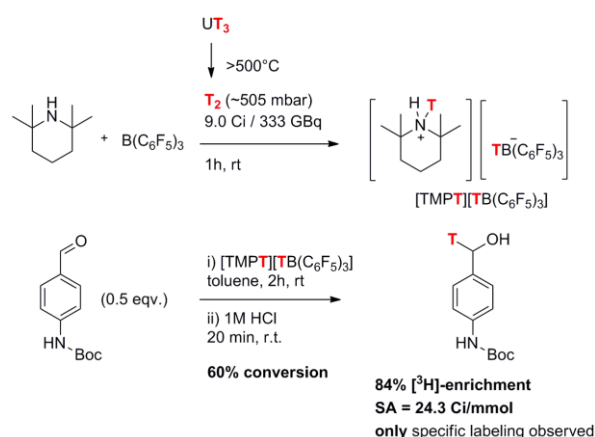


Fig. 1 The first example of FLP-assisted tritium labeling of an alcohol derivative.

The authors thank the Academy of Sciences of the Czech Republic for financial support on this project (RVO: 61388963). A.M.'s fellowship at the Hevesy laboratory was founded by The International Atomic Energy Agency (IAEA) (C6/CZR/11001).

- [1] Aleš Marek, Martin H. F. Pedersen; *Tetrahedron* 2015, 71, 917–921.

3Po29**VLASTNOSTI NANOKOMPOZITOV NA
BÁZE TERMOPLASTICKEJ MATRICE**

Zuzana Nógellová, Daniela Joheć Mošková,
Michaela Sedničková, Ivan Chodák

Ústav polymérov, Slovenská akadémia vied,
Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, Slovensko,
zuzana.nogellova@savba.sk

Práca je zameraná na hodnotenie fyzikálnych vlastností a štruktúry kompozitov vybraných termoplastických matric a plnív na báze vrstevnatých silikátov. Ako polymérna matrica bol použitý nízkohustotný polyetylén, polykaprolaktón a polyamid 12. Porovnávali sa rôzne plnivá (komerčné, organomodifikované – pripravené v laboratórnych podmienkach, ako aj nemodifikované). Koncentrácia plniva v kompozitoch bola 1 až 10 hm. %

Z výsledkov mechanických vlastností vidno, že zvyšovaním koncentrácie plniva sa znižuje pevnosť v ťahu a ťažnosť a zvyšuje sa modul pružnosti. Miera zmien mechanických parametrov závisí od modifikácie plniva a od príslušného typu polymérnej matrice. Použitie experimentálne modifikovaných plnív najlepšie ovplyvnilo mechanické vlastnosti kompozitov s PA matricou. Pri kompozitoch s PCL sa získali najlepšie výsledky s komerčne modifikovaným plnivom.

Meraním reologických vlastností sme získali určité informácie o zmenách v štruktúre. Pri použití komerčného modifikovaného plniva sa najmenšie zmeny pozorovali u PE matrice, kým u kompozitov na báze PCL a PA sa zmeny v štruktúre pozorovali už pri 3% obsahu plniva. Pri pozorovaní vplyvu typu plniva v PCL je vidno, že použitím komerčného modifikovaného plniva dochádza k určitým štrukturálnym zmenám už pri 3% plniva, pri experimentálnych organomodifikovaných plnivách dochádza k zmenám až pri maximálnej koncentrácii 10% a pri nemodifikovanom plnive neboli pozorované štrukturálne zmeny v celom koncentračnom rozsahu.

Táto práca vznikla za podpory projektov VEGA 2/0108/14 a APVV 0694-12.

3Po30**ACTUATORS ON THE BASE OF
ETHYLENE VINYL ACETATE/CARBON
NANOTUBES/DYES NANOCOMPOSITES**

Klaudia Czaniková¹, Asma Ben Sghaier², Mohamed M. Chehimi^{2,3}, Mária Omastová¹

¹ Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences,
Dúbravská cesta 9,
845 41 Bratislava, Slovakia – Email:
Maria.Omastova@savba.sk

² Sorbonne Paris Cité, ITODYS, University Paris
Diderot and CNRS 7086, 15 rue Jean de Baïf, 75013
Paris, France

³ Institut de Chimie et des Matériaux Paris-Est
(ICMPE), CNRS (UMR7182), 2-8 rue Henri Dunant,
94320 Thiais, France

In general, actuators have ability to change their dimension upon external stimulus. Polymer/carbon nanotubes (CNT) nanocomposites represent promising materials for designing and fabricating new stimuli responsive materials [1]. CNT possess multifunctional characteristics, and also respond to light irradiation in wide range of optical wavelength. New photo-actuating materials based on the commercial elastomer ethylene vinyl acetate (EVA) and well-dispersed CNT have been developed. The photo-thermal actuation effect of the prepared nanocomposites containing different quantity of nanofiller will be discussed [2].

The photo-thermal actuation measurements were performed for stretched strips by dynamic mechanical analyser (DMA) equipped by light-emitted diode. The best actuation responses were measured for the nanocomposite containing a lower amount of modified MWCNT, about 0.1 wt.%. This contribution also will reports new modified MWCNT in the presence of dyes such as Rhodamine and the low cost Congo Red which both have “aniline” moiety which can further be reacted with NaNO₂ in order to obtain in situ the corresponding diazotized dyes that are expected to readily react with the carbon nanotubes through radical coupling [3]. The mechanism of the elastomer/CNT actuators, alignment study of CNT within the polymeric matrix, effect of photo-thermal actuation results as measured actuation stresses in response to light, and long-term stability will be reported.

Acknowledgement: This work was supported by bilateral Slovak-French project SK-FR-2013-0033, and by project VEGA 02/0149/14.

References

- [1] Klaudia Czanikova, Nuria Torras, et al. Sensors and Actuators, Part B: Chemical 186 (2013) 701-710.
 [2] Klaudia Czaniková, Igor Krupa, Maria Omastova et al., Journal of Nanophotonics 6 (2012) 063522.
 [3] Zakaria Salmi et al. Journal of Colloid Science and Biotechnology 2 (2013) 53-58.

3Po31

SYNTEZA SÉRIE 1-[4-ALKYLSULFANYL)FENYL]-3,3-DIMETHYLGUANIDINŮ S ANTIFUNGÁLNÍ AKTIVITOU

Palát Karel, Emelin Evghenia, Dominika Jarešová, Buchta Vladimír, Petr Jílek, Marcela Vejsová

Farmaceutická fakulta Univerzity Karlovy, Heyrovského 1203, CZ-500 05 Hradec Králové, Česká republika, palat@faf.cuni.cz

V návaznosti na dříve syntetizované sloučeniny [1] byla několikastupňovou syntézou vycházející ze 4-substituovaného nitrobenzenu [1,2] připravena série titulních látek (viz Schéma 1).

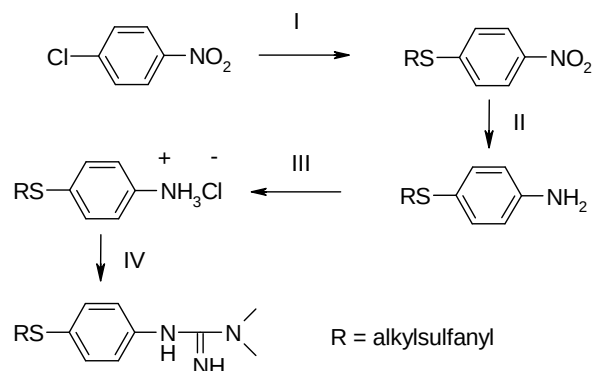


Schéma 1. I – thiol, akt. měď, uhličitán draselný, DMF [1]; II - chlorid cínnatý [2]; III – chlorovodík; IV - N,N-dimethylkvanamid [1]

U připravených látek byla studována závislost mezi strukturou a biologickou aktivitou v testech na antifungální účinnost.

Sloučeniny s alkylsulfanylsupstitucí s délkou řetězce C9-C14 vykazují dobrou biologickou aktivitu. Minimální inhibiční koncentrace dosahuje u nejúčinnějších sloučenin hodnot 1,95-31,25 $\mu\text{mol/l}$. Aktivita sloučenin je srovnatelná se standardem, pro který byl použit dodin, a je velice podobná u všech testovaných kmenů.

Práce byla podpořena granty GAČR GA14-08423S a GAUK 299/2006/B-CH/FaF

- [1] Braunerová G.; Buchta V.; Silva L.; Kuneš J.; Palát K.: Farmaco 59, 443 (2004).

- [2] Bellamy F. D., Ou K.: Tetrahedron Lett. 25, 839 (1984).

3Po32

NEW COMPOSITE ELECTRODE MATERIALS FOR LITHIUM BATTERIES

Anna Pidluzhna^{1,2}, Silvia Podhradská¹, Daria Matulka², Mária Omastová¹

¹Polymer Institute of Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava 45, Slovakia

²Lviv Polytechnic National University, Kotlyarevsky str. 1, Lviv 79013 Ukraine

silvia.podhradska@savba.sk, ussurian@yahoo.com

There are a wide range of electrode materials applicable in lithium batteries. Titanium dioxide is one of them because of its appropriate structure for reversible Lithium intercalation process, high value of lithium chemical potential in it and high chemical stability at the contact with liquid electrolytes. It is also ecologically harmless and cheap material.

Still lithium electrochemical elements with TiO_2 demonstrate low rate capabilities because of poor electronic conductivity of initial titania powder. Many researches are focused on solving this problem with application of different approaches and techniques, among which are doping of TiO_2 , reducing the size of a particles and preparation of new types of composites [1-2].

We prepared new type of titanium dioxide/carbon black (TiO_2/CB) composites which were used as a component in lithium batteries. Moreover we used polypropylene as polymer binder for low cost electrode preparation. Prepared materials were characterized by various methods, including SEM and X-ray photoelectron spectroscopy for obtaining information about chemical and electron state of the materials. The electrochemical behaviour of prepared samples was characterized by impedance spectroscopy and galvanostatic discharge technique.

Acknowledgment. The work was supported by project VEGA 2/0149/14.

References

- [1] Y. Yan, B. Hao, D. Wang, G. Chen, E. Markweg, A. Albrecht, P. Schaaf, J. Mater. Chem. A, 1 (2013) 14507-14513.
 [2] S. Ivanov, L. Cheng, H. Wulfmeier, D. Albrecht, H. Fritze, A. Bund, Electrochimica Acta, 104 (2013) 228– 235

3Po33

ŠTÚDIUM VPLYVU CHRÁNIACICH FUNKČNÝCH SKUPÍN NA OXIDATÍVNE ŠTIEPENIE C=C DVOJITEJ VÄZBY SUBSTRÁTOV VYCHÁDZAJÚCICH Z KYSELINY ŠIKIMOVEJ

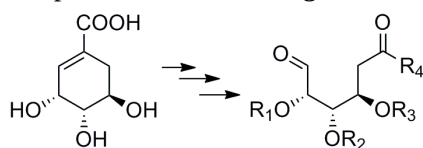
Miroslav Psotka¹, Jozef Gonda¹, Miroslava Martinková¹

¹Univerzita P.J. Šafárika, Šrobárova 2, 041 80 Košice, miroslav.psotka@gmail.com

V posledných rokoch sa čoraz častejšie v médiách aj vedeckých článkoch rozoberá pojem antimikrobiálna rezistencia (AMR), tzn. rezistencia baktérii na voľne dostupné antibiotiká, antivirotiká a antimikrobiálne liečivá. Spôsobuje vrásky na čelách vedcov a výskumných skupín po celom svete, ktoré sa snažia objaviť, izolovať a synteticky pripraviť nové a účinné látky voči týmto rezistentným baktériám.^[1]

Kyselina šikimová (kyselina 3,4,5-trihydroxy-1-cyklohexén-1-karboxylová; **1**) je biela kryštalická látka izolovaná z ovocia rastlín rodu *Illicium* (rôzne druhy anízov). Je taktiež dôležitým prekursorom biosyntézy aromatických aminokyselín (fenylalanín, tyrozín a tryptofán) u rastlín v šikimátvej ceste.^[2]

V tejto práci sme sa bližšie venovali oxidatívne štiepeniu derivátov odvodených od kyseliny šikimovej s rôznymi chrániacimi funkčnými skupinami (Obr.1). Cieľom bolo zistiť ich vplyv na priebeh oxidatívneho štiepenia z hľadiska reakčného času a výťažnosti. V neposlednom rade sme sa snažili nájsť derivát s najlepšou kombináciou chrániacich funkčných skupín, ktorý bude následne použitý pri príprave zlúčenín s potencionalnou biologickou aktivitou.



I.: R_1 =TBDMS; R_2+R_3 =2,3-dimetoxybután-2,3-dioxy; R_4 =COO^tPr

II.: R_2+R_3 =2,3-dimetoxybután-2,3-dioxy; R_4 =COOMe

a.) R_1 =TBDMS; b.) R_1 =Ac; c.) R_1 =Bn; d.) R_1 =TBDPS

III.: R_1 =TBDMS; R_2+R_3 =2,3-dimetoxybután-2,3-dioxy; R_4 =CH₂OR₅

a.) R_5 =TBDMS; b.) R_5 =Ac; c.) R_5 =Bn; d.) R_5 =Bz

IV.: $R_1=R_2$ =Me₂C; R_3 =TBDMS; R_4 =CH₂OR₅

a.) R_5 =Ac; b.) R_5 =Bz

V.: $R_1=R_2$ =Me₂C; R_4 =CH₂OTBDMS

a.) R_3 =Ac; b.) R_3 =Bz

Obr. 1 Pripravené oxidatívne štiepené deriváty

Týmto smerom by som chcel vyjadriť svoje poďakovanie Vedeckej Grantovej Agentúre (VEGA 1/398/14) a APVV-14-0883 za finančnú podporu.

[1] WHO Antimicrobial resistance: Global Report on Surveillance **2014**; 1-257.

[2] Bochkov D.V.; Sysolyatin S.V.; Kalashnikov A.I. a Surmacheva I.A. *J.Chem.Biol.* **2011**; 5-17.

3Po34

APLIKACE BOR-WITTIGOVY REAKCE V CHEMII SACHARIDŮ

Kristýna Řepková¹, Kamil Parkan¹

¹ Ústav chemie přírodních látek, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika repkovak@vscht.cz

Modifikace cukerných struktur jsou významným nástrojem při hledání nových biologicky aktivních látek s potenciálním farmakologickým využitím. C-glykosidy a C-glykosylideny (exoglykaly) jsou zajímavou skupinou cukerných derivátů v jejichž molekule je C-O vazba nahrazena jednoduchou nebo dvojnou vazbou uhlík-uhlík. Pro syntézu těchto sloučenin se obvykle využívají reakce prodlužující uhlovodíkový řetězec, nejčastěji Wittigova reakce [1] nebo Julia-Kocienskiho olefinace [2], následované specifickými modifikacemi.

Během hledání nových metod pro syntézu C-vázaných sacharidových jednotek jsme se rozhodli pro využití nepříliš známé bor-Wittigovy reakce [3], která nebyla v oblasti cukerné chemie doposud testována.

Tato práce byla podpořena Grantovou agenturou České republiky (grant č. 15-17572S)

[1] D. C. Koester, E. Kriemen, D. B. Werz, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2013**, 52, 2985–2989.

[2] S. Habib, F. Larnaud, E. Pfund, T. Lequeux, B. Fenet, P. G. Goekjian, D. Gueyrard, *Eur. J. Org. Chem.*, **2013**, 10, 1872–1875.

[3] D. S. Matteson, R. J. Moody, *Organometallics*, **1982**, 1, 20-28.

3Po35

VLIV IONIZUJÍCÍHO ZÁŘENÍ NA BIOKOMPATIBILNÍ POLYMERY

Ondřej Sedláček¹, Jan Kučka¹, Martin Hrubý¹

¹Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6, sedlacek@imc.cas.cz

Vedle chirurgie a chemoterapie je radioterapie jedním z nejúčinnějších způsobů léčby nádorových onemocnění. Je založena zejména na radiačním poškození nádorové tkáně ionizujícím zářením při minimalizaci radiační zátěže zdravých tkání. Synergického efektu radio- a

chemoterapie se využíva v kombinovanej terapii nádorů.

Biokompatibilní polymery nalézají široké využití v medicínských oborech, např. pro biokompatibilizaci povrchů, tvorbu hydrogelů či systémů pro cílený transport léčiv. Při současném použití léčby polymerními systémy a radioterapii (ať již pomocí externího ozařování nebo pomocí radionuklidu navázaného na polymer), stejně tak jako pro běžně užívanou radiační sterilizaci polymerních systémů, je zásadní znát efekt ionizujícího záření na strukturu polymerních řetězců. Prezentovaná studie popisuje chování různých biokompatibilních polymerů (poly[N-(2-hydroxypropyl)methakrylamid]u, polyethylenoxidu, polyvinylpyrrolidonu, poly(2-ethyl-2-oxazolinu), poly(N-isopropylakrylamid)u) po ozáření rozdílnými dávkami záření beta respektive gama.

Autoři děkují za finanční podporu Ministerstvu Průmyslu a obchodu České republiky (grant č. FR-TI4/625).

3Po36

INFLUENCE OF SURFACE MODIFICATION OF MONTMORILLONITE ON RUBBER COMPOSITES

Michaela Sedničková¹, Daniela Joheć Mošková¹, Ivica Janigová¹, Ľuboš Jankovič², Ivan Chodák¹

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

²Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, Slovakia, michaela.sednickova@savba.sk

In the recent years, the polymer-clay nanocomposites have become the subject of interest of many researches. The most used clay minerals are montmorillonites, which belong to the group of smectites and are characterized by interlayer structure. In this work were investigated the montmorillonite saturated by Na⁺ and the organo-montmorillonites modified by intercalation of two different quaternary ammonium compounds (octadecylammonium - ODA and oleylammonium - OA) into the interlayer space through the ion exchange. Organo-clay natural rubber composites were prepared by melt intercalation of natural rubber with the unmodified or organo-modified montmorillonite of Jelšovský Potok bentonite. Modification of the filler surface leads to an increase of compatibility of montmorillonites

with hydrophobic polymer matrices such as natural rubber. The rising mass content (0 to 10 phr) of MMT fillers in the composites resulted in the improvement of the mechanical properties namely tensile strength at break and tensile strain at break. The morphology of the rubber composites was monitored by transmission electron microscopy (TEM) revealing interaction between natural rubber elastomeric matrix and modified filler ODA, which contains organic octadecylammonium surfactant. The details of structure were confirmed by X-ray diffraction (XRD).

This work was supported by the projects APVV 0694-12 and VEGA 2/0108/14.

3Po37

STERESELECTIVE CU-CATALYZED DOUBLE 1,4-ADDITION IN THE PRESENCE OF PHOSPHANE-CARBENE LIGANDS

Zuzana Sorádová¹, Jana Máziková¹, Mária Mečiarová¹, Radovan Šebesta¹

¹Department of Organic Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University in Bratislava

galestokova@fns.uniba.sk

Copper-catalyzed conjugate additions of organometallic reagents are among the most important strategies for enantioselective C–C bond formations. The reactive metal enolates generated by conjugate additions can be trapped by appropriate electrophiles.[1]

Stable carbenes, in particular N-heterocyclic carbenes have many interesting properties. Carbenes containing ferrocenyl substituents are interesting target compounds in catalysis due to the stereoelectronic influence of the ferrocenyl group and unique coordinating properties of the carbene center. Chiral ferrocene phosphane-carbene ligands were tested in the Cu-catalyzed asymmetric 1,4-addition of Grignard reagents to α,β-unsaturated carbonyl complex. [2]

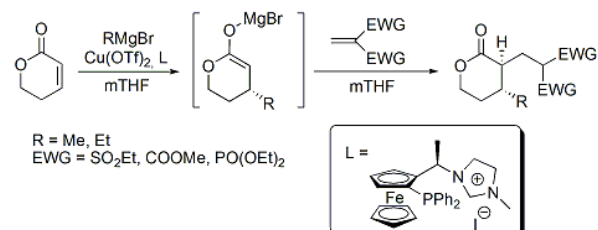


Figure 1

Addition of Grignard reagents to 5,6-dihydro-2H-pyran-2-one, catalyzed by ferrocenyl phosphane-

carbene ligand afforded substituted magnesium enolates, which reacted in one-pot arrangement in another Michael addition with activated alkenes. The products were obtained in high enantiomeric purities (up to er 98:2) and good yield (33-80%). [3]

This research was supported by the Slovak Research and Development Agency (APVV-0321-12).

- [1] a) H.-C. Guo, J.-A. Ma: *Angew. Chem. Int. Ed.* [2006] 45, 354-366. b) Z. Galeštoková, R. Šebesta: *Eur. J. Org. Chem.* [2012] 6688-6695.
 [2] a) T. Dröge, F. Glorius, *Angew. Chem., Int. Ed.* [2010] 49, 6940-6952. b) J. Csizmadiová, M. Mečiarová, A. Almássy, B. Horváth, R. Šebesta: *J. Organomet. Chem.* [2013] 737, 47-52.
 [3] Z. Sorádová, J. Máziková, M. Mečiarová, R. Šebesta, *Tetrahedron: Asymmetry*, [2015] 26, 271-275.

3Po38

SYNTÉZA CYKlickÝCH VINYLKETONŮ A JEJICH HYDROKYANACE

Jan Šimbera^{1,2}, Karel Zelinka¹, Kateřina Hlaváčková¹, Dana Herová² a Pavel Pazdera²

¹*Lučební závody Draslovka a.s. Kolín, Havlíčkova 605, 28099 Kolín, Czech republic*

²*Centrum pro syntézu za udržitelných podmínek a jejich management, Ústav chemie, Masarykova univerzita, Kotlářská 2, 611 37 Brno, Czech Republic
 jan.simbera@draslovka.cz*

Cyklické vinylketony jsou potenciální suroviny pro syntézu esterů nebo laktonů. Takto získávané laktony nebo estery mají použití například jako fragrance v kosmetickém průmyslu nebo při výrobě mýdel, pracích prostředků apod. Prvním krokem syntézy těchto látek z vinylketonů je adice kyanovodíku na aktivovanou dvojnou vazbu uhlík-uhlík ve výchozím vinylketonu.

Prezentována je optimalizovaná syntéza komerčně nedostupných vinylketonů, které jsou prekurzory pro žádané estery nebo laktony, a jejich následná hydrokyanace pomocí HCN. Známé hydrokyanační procesy na podobných substrátech jsou často nevhodné pro aplikaci do průmyslového měřítka, zejména použité suroviny jsou drahé a nevhodné (alkalické kyanidy, rozpouštědla typu DMF).

Výhoda našeho procesu spočívá v použití levnějšího HCN jako hydrokyanačního činidla v kombinaci s vhodným rozpouštědlem a katalyzátorem. Tento inovovaný proces je jednodušší a levnější a poskytuje produkty ve velmi dobrých výtěžcích a čistotě, která

umožňuje další zpracování v syntéze finálních produktů.

- [1] Projekt TA03010633 Progresivní udržitelné technologie pro syntézy chemických specialit z oblasti kyanové chemie je řešen s finanční podporou TAČR

3Po39

STUDIUM GEOMETRIE A KINETIKY DEGRADACE INJIKOVATELNÝCH DEP NA BÁZI POLY(N-ISOPROPYLAKRYLAMIDU)

Pavel Švec¹, Ondřej Sedláček¹, Andrea Gálisová², Markéta Jirátová², Daniel Jiráček², Martin Hruby^{1*}

¹*Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6, Česká republika, * - e-mail: mhruby@centrum.cz*

²*Institut klinické a experimentální medicíny, Vídeňská 1958/9, 140 21 Praha 4, Česká republika*

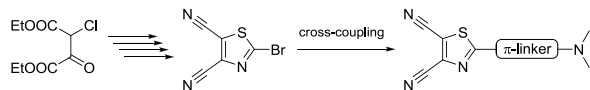
Termoresponzivní polymery mohou být dobře rozpustné ve vodě při pokojové teplotě, zvýšením teploty však dochází k jejich vratné fázové separaci z roztoku. Pokud je do tkáně injikován roztok polymeru, k jehož fázovému přechodu dochází při tělesné teplotě (37 °C), lze v těle vytvořit polymerní implantát využitelný pro cílenou dopravu léčiv nebo tkáňové inženýrství. Poly(N-isopropylakrylamid) byl v naší skupině již dříve úspěšně zkoumán jako prostředek pro tvorbu injikovatelných intratumorálních dep pro nádorovou brachyterapii (lokální radioterapie). Ačkoli poly(N-isopropylakrylamid) není biochemicky degradovatelný, pomalu dochází k jeho rozpouštění, odplavování a následnému vyloučení z organismu ledvinami nebo hepatobiliární cestou. Pro další studium aplikací například v léčbě poškození nervové soustavy je velmi důležitá detailní znalost geometrie a kinetika degradace vytvářených polymerních dep. Pro tento účel byl připraven semitelechelický poly(N-isopropylakrylamid) o vhodné molekulové hmotnosti s navázaným kontrastním činidlem (Gd-DOTA). Polymerní depa vytvořená s tímto polymerem byla následně sledována *in vivo* pomocí magnetické rezonance (MRI).

Autoři děkují za finanční podporu Akademii věd České republiky (grant č. M200501201), Grantové agentuře České republiky (grant č. 13-08336S), Ministerstvu Průmyslu a obchodu České republiky (grant č. FR-TI4/625) a Agentuře zdravotnického výzkumu (grant č. 15-25781A).

3Po40**SYNTÉZA A VYUŽITÍ THIAZOL-4,5-DIKARBONITRILU V PUSH-PULL SLOUČENINÁCH**Šárka Švecová,¹ Filip Bureš¹

¹Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika, sarka.svecova@student.upce.cz

Typický organický push-pull chromofor se skládá ze silných elektron akceptorů a donorů spojených π -konjugovaným systémem. Toto uspořádání zajišťuje efektivní intramolekulární přenos náboje (ICT), molekula se významně polarizuje a stává se dipólem. Tyto sloučeniny nalézají širokou škálu uplatnění v oblastech optoelektroniky a nelineární optiky (NLO). V současné době jsou hledány nové, účinnější a polarizovatelnější akceptorní jednotky na bázi heterocyklických sloučenin. Vzhledem k velice úspěšným aplikacím pětičlenných heteroaromátů jako je thiofen nebo imidazol [1], zaměřili jsme naši pozornost na thiazol. V roce 2010 byla v naší skupině syntetizována série šesti push-pull chromoforů na bázi 1H-imidazol-4,5-dikarbonitrilu s modifikovanou délkou π -konjugovaného můstku, přičemž bylo použito N,N-dimethylamino skupiny jako donoru [2]. S cílem modifikovat optoelektronické vlastnosti [3] a srovnat polarizovatelnost imidazolu a thiazolu, je na tyto výsledky nyní navázáno studium strukturně analogických chromoforů s thiazol-4,5-dikarbonitril akceptorem (Obr. 1). Byla vyvinuta efektivní syntéza 2-bromthiazol-4,5-dikarbonitrilu, který lze dále modifikovat cross-coupling reakcemi a zavést tak π -konjugovaný systém opatřený N,N-dimethylamino donorem. V příspěvku bude diskutována především syntéza cílových sloučenin popřípadě jejich základní fyzikálně-chemické vlastnosti.



Obr. 1 Nové chromofory s thiazol-4,5-dikarbonitril akceptorem

Tato práce byla podpořena Technologickou agenturou České republiky (TE01020022, Flexprint).

- [1] J. Kulháněk, F. Bureš: *Beilstein J. Org. Chem.* **2012**, 8, 25.
 [2] J. Kulháněk, F. Bureš, O. Pytela, T. Mikysek, J. Ludvík, A. Růžička: *Dyes Pigm.* **2010**, 85, 57.
 [3] F. Bureš: *RSC Advances* **2014**, 4, 58826.

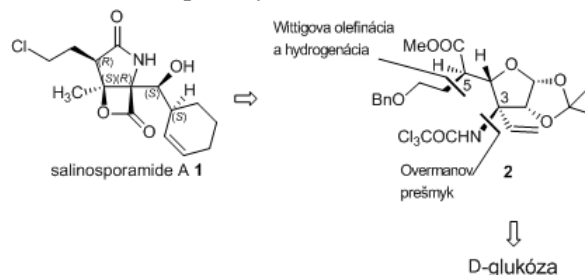
3Po41**STEREOSELEKTIVNÁ SYNTÉZA METYL-(5R)-5-C-[2'-(BENZYLOXY)ETYL]-3,5-DIDEOXY-1,2-O-IZOPROPYLIDÉN-3-(2',2',2'-TRICHLÓRACETAMIDO)-3-C-VINYL- β -L-ARABINO-HEXOFURÁNURONÁTU AKO PREKURZORA SALINOSPORAMIDU A**

Margaréta Takácsová¹, Miroslava Čonková¹,
 Miroslava Martinková¹, Jozef Gonda¹

¹Univerzita P. J. Šafárika, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Katedra organickej chémie, Moyseova 11, 041 67 Košice, e-mail: margareta.takacsova@student.upjs.sk

Pred viac ako desiatimi rokmi bol bortezomib, ako prvý proteazómový inhibítor, schválený pre liečbu mnohopočetného myelómu, čím enormne vzrástol záujem o nové inhibítory proteazómu, či už syntetické alebo prírodné. Bolo objavených niekoľko prírodných inhibítorov, z ktorých najvyššiu aktivitu vykazuje salinosporamid A **1**, momentálne zaradený už aj do klinických testov.[1,2] **1** patrí do skupiny β -laktónových inhibítorov a spôsobuje ireverzibilnú inhibíciu 20S proteazómu, ktorá indukuje zastavenie bunkového cyklu, apoptózu a súčasne potláča angiogézu a tvorbu metastáz.[2]

Ako východisková látka pre stereoselektívnu syntézu metylesteru **2**, pokročilého prekurzora salinosporamidu A, bola zvolená komerčne dostupná D-glukóza. Kľúčovými krokmi v tejto syntéze boli stereokontrolované zavedenie hydroxyetylového substituenta na uhlík C-5 využitím Wittigovej olefinácie a následnej katalytickej Pd katalyzovanej hydrogenácie a stereoselektívne vybudovanie aminokyselinového zoskupenia na uhlíku C-3 prostredníctvom [3,3]-sigmatropného Overmanovho prešmyku trichlóracetimidátov.

**Schéma 1.**

Táto práca vznikla s podporou grantov APVV-14-0883, VEGA 1/0398/14 a VEGA 1/0568/12.

- [1] Moreau, P.; Richardson, P. G.; Cavo, M.; Orłowski, R. Z.; San Miguel, J. F.; Palumbo, A.; Harousseau, J.-L. *Blood*, **2012**, 120, 947-959

- [2] Frankland-Searby, S.; Bhaumik, S. R. *Biochim. Biophys. Acta*, **2012**, 1825, 64-76.

3Po42

PHARMACOLOGICAL EFFECT OF BEECH GLUCURONOXILAN SULFATES

Veronika Sivová¹, Gabriela Nosáľová¹, Ľudovít Jureček¹, Jozef Turjan², Ján Kozák², Peter Capek²

¹Jessenius Faculty of Medicine, Comenius University, Sklabinská 26, 036 01 Martin

²Institute of Chemistry SAS, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, jozef.turjan@savba.sk

Fagus sylvatica L. is a large deciduous tree (*Fagaceae*), commonly known as European or common beech. Recent trends in *Fagus* are focused mainly on hemicelluloses. It has been reported that xylans or glucuronoxylans show a wide range of biological activities, namely antioxidant, anticoagulant, and antimicrobial. As an important part of cereals, xylan related polymers also exhibit probiotic and positive digestive, antidiabetic and hypocholesterolemic effects. Lately, an antitussive activity of *Fagus* glucuronoxylan sulfate has been described [1].

The aim of study was to isolate the 4-O-methylglucuronoxylan from *F. sylvatica* and to prepare low molecular weight fractions by enzymatic depolymerization of the polymer. Enzymatic depolymerization of polymer (≈ 23 kDa) afforded three fractions of molecular mass 2.8, 2.2 and 1.0 kDa. The native polymer and its fractions were decorated by sulfate groups to highly sulfated products which were used for antitussive tests. Pharmacological studies showed that molecular mass does not affect the cough suppressive effect of glucuronoxylan sulfates. The increase in their dose provoked only slight increase of cough-suppressing activity indicating thus that the effect of glucuronoxylan sulfate is not dose-dependent. Studies confirmed beneficial effect of glucuronoxylans and provide thus a scientific basis for the application of hemicellulose derivatives in herbal medicine as an antitussive agent.

Acknowledgements. This work was supported by the APVV grant nos. 0305-12 and 0125-11, and by the VEGA grant no. 2/0018/15.

- [1] Nosáľová, G., Jureček, L., Turjan, J., Capek, P., Prisenžňáková, L., Fraňová, S., *Int. J. Biol. Macromol.* **67**, (2014), 312–317.

3Po43

STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA NOVÝCH β -AMINOKYSELÍN A ŠTÚDIUM ICH ORGANOKATALYTICKEJ AKTIVITY V INTRAMOLEKULOVÝCH ALDOLOVÝCH CYKLIZÁCIÁCH

Monika Tvrdoňová¹, Miroslava Martinková¹ a Jozef Gonda¹

¹Univerzita P. J. Šafárika, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Katedra organickej chémie, Moyzesova 11, 041 67 Košice, e-mail: monika.tvrdonova@upjs.sk

Od roku 1971, kedy bola prvý krát popísaná intramolekulová asymetrická priama aldolova reakcia triketónu **1a** katalyzovaná aminokyselinou (S)-prolínom (Schéma 1) [1], bolo preštudovaných množstvo organických zlúčenín ako potenciálnych organokatalyzátorov. Asymetrická cyklizácia triketónov **1** na príslušné enóny **2** našla široké uplatnenie pri syntéze mnohých prírodných látok s terpenoidnou alebo steroidnou štruktúrou. Ako zdroj chiralít v týchto reakciách sa častokrát používajú nielen α -, ale aj β -aminokyseliny s vynikajúcimi výťažnosťami a enantioselektivitou [2].

Táto práca sa zaoberá stereoselektívnou syntézou spiro β -aminokyseliny **3** a jej vetveného analógu **4**. Kľúčovým krokom ich syntézy bolo vybudovanie kvartérneho zoskupenia na uhlíku C-3 pomocou [3,3]-sigmatropného aza-Claisenovho prešmyku alytiokyanátov pripravených z D-glukózy [3]. Pripravené látky boli použité ako organokatalyzátory v intramolekulovej aldolovej cyklizácii **5** a 6-článkových triketónov **1a** a **1b**, a bola komplexne preštudovaná ich organokatalytická aktivita za rôznych podmienok.

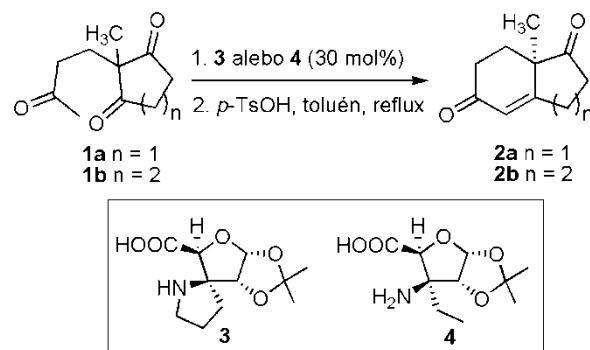


Schéma 1.

Táto práca vznikla s finančnou podporou grantov VEGA 1/0398/14, VEGA 1/0568/12 a APVV-14-0883.

- [1] (a) Hajos, Z. G.; Parrish, D. R., German Patent DE 2102623, **1971**; (b) Eder, U., Sauer, G., Wiechert,

R., *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, **1971**, 10, 496-497.

- [2] Davies, S. G.; Russell, A. J.; Sheppard, R. L.; Smith, A. D.; Thomson, J. E., *Org. Biomol. Chem.*, **2007**, 5, 3190-3200.
- [3] Gonda, J., Martinková, M., Raschmanová, J., Balentová, E., *Tetrahedron: Asymmetry*, **2006**, 17, 1875-1882.

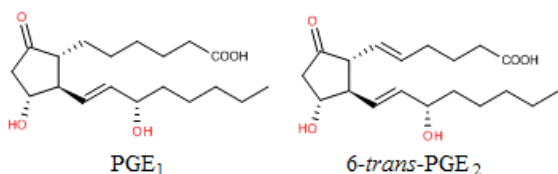
3Po44

67. ZJAZD CHEMIKOV, 7. – 11. SEPTEMBER 2015, VYSOKÉ TATRY

Jiří Veselý¹, Ivan Veselý¹, Jan Pavlík¹

¹Cayman Pharma s.r.o., ul. Práce 657, 277 11 Neratovice, jiri.vesely@caymanpharma.cz

Pri výrobe prostaglandinu E₁ (PGE₁) dochází ve stupni hydrogenace dvojné vazby v poloze 5,6 příslušného intermediátu syntézy také k migraci dvojné vazby. V důsledku této izomerizace je finální produkt PGE₁ kontaminován nečistotou 6-*trans*-PGE₂. Do současné doby nebyla popsána syntetická cesta vedoucí k PG derivátům obsahujícím nesubstituovanou dvojnou vazbu v poloze 6,7 v horním řetězci PG skeletu. Pro přípravu referenčního materiálu 6-*trans*-PGE₂ jsme navrhli a úspěšně realizovali nový postup představující devítistupňovou syntézu z dostupného výrobního intermediátu.



3Po45

MAKROPORÉZNY UHLÍKOVÝ SCAFFOLD PRE TKANIVOVÉ INŽINIERSTVO

Miroslav Vetrík¹, Martin Pařízek², Olívia Policianová¹, Helena Hlídková¹, Miroslav Šlouf¹, Martin Přádný¹, Martin Hrubý¹

¹Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6, vetrík@seznam.cz

²Fyziologický ústav AV ČR, v.v.i., Vídeňská 1083, 142 20 Praha 4

Materiály na báze uhlíku si pomaly nachádzajú využitie v tkanivovom inžinierstve. Jedna z hlavných úloh tkanivového inžinierstva je vytvorenie vhodnej trojrozmernej štruktúry, ktorá podporuje rast, proliferáciu a migráciu

buňiek. Umelo vytvorené scaffoldy, ktoré sú zamýšľané pre využitie v medicíne, by mali verne napodobňovať biologické štruktúry. Na prípravu makroporézneho uhlíkového scaffoldu sme použili polyakrylonitrilový roztok v dinitrile kyseliny jantarovej. Po zatuhnutí zmesi vznikol kryogel, ktorého makroporézna štruktúra vznikla po vymytí sukcinonitrilu. Vzniknutý makroporézny polyakrylonitril bol zahriaty na teplotu 350 °C za vzniku karbonizovaného polyakrylonitrilu (kPAN). Unikátne vlastnosti kPAN pre použitie v tkanivovom inžinierstve ešte nie sú ani zďaleka dôkladne preskúmané. kPAN pri rôznych teplotách karbonizácie dosahuje viacero druhov štruktúr, ktoré boli charakterizované pomocou solid state NMR. Takto pripravený uhlíkatý scaffold sa morfológicky približuje vnútornej štruktúre kostí. Makroporézny uhlíkatý scaffold bol študovaný z hľadiska osteo-indukčných vlastností, adhesie a rastu ľudských osteoblastických buniek. Na základe nášho výskumu sme dospeli k názoru, že kPAN má osteo-indukčné vlastnosti, podporuje diferenciáciu osteoblastických buniek derivovaných z mesenchymálnych kmeňových buniek a to aj bez použitia osteogenetických faktorov. Tento makroporézny materiál by mohol byť využitý pre kultiváciu osteoblastických buniek.

Aurori ďakujú za finančnú podporu Akademii vied Českej republiky (grant č. M200501201), Grantovej agentúre Českej republiky (grant č. 13-08336S), Ministerstvu Priemyslu a obchodu Českej republiky (grant č. FR-TI4/625) a Agenture zdravotníckeho výskumu (grant č. 15-25781A).

3Po46

SYNTHESIS AND ANTIMICROBIAL ACTIVITY OF NOVEL SULFONAMIDE DERIVATIVES

Jarmila Vinšová¹, Martin Krátký¹, Martin Kufa¹, Jiřina Stolaříková²

¹Department of Inorganic and Organic Chemistry, Faculty of Pharmacy, Charles University in Prague, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, Czech Republic, vinsova@faf.cuni.cz

²Laboratory for Mycobacterial Diagnostics and Tuberculosis, Regional Institute of Public Health in Ostrava, Partyzánské náměstí 7, 702 00 Ostrava, Czech Republic

Therapeutic difficulties and resistance-related complications have been reported for many bacterial species, including *Mycobacterium tuberculosis*, a causative agent of tuberculosis

(TB), nontuberculous (atypical) mycobacteria, Gram-positive and Gram-negative bacteria including methicillin-resistant *Staphylococcus aureus* (MRSA), *Enterococcus* sp. for fungi. Sulfonamides have been widely used for the therapy of a wide range of bacterial infections; moreover, these derivatives were used for the treatment of TB until early 1950s but were later abandoned mostly for their side effects and the development of novel more efficient drugs. Recently, these derivatives have been found useful for the therapy of some infections caused by nontuberculous mycobacteria.

We have designed and synthesized a series of novel sulfamethoxazole/sulfathiazole-based ureas, their cyclic forms imidazolidine-2,4,5-triones by the reaction of sulfonamides with isocyanates in acetonitrile and following cyclization via oxalyl chloride in tetrahydrofuran [1]. Also *N*-acylated sulphonamides were obtained by the reaction with corresponding acyl chlorides.

All prepared derivatives were evaluated *in vitro* against Gram-positive and Gram-negative bacteria, fungi, *M. tuberculosis* and atypical mycobacteria. The most promising compounds showed minimum inhibitory concentrations against mycobacteria of 4 μ M. Gram-positive bacteria including MRSA as well as fungal strains were inhibited at concentrations starting from 125 μ M. Most of the derivatives showed low cytotoxicity.

The work was financially supported by the Research Project IGA NT 13346 (2012).

[1] Martin Krátký, Jana Mandíková, František Trejtnar, Vladimír Buchta, Jiřina Stolaříková, Jarmila Vinšová: Chem. Pap., (2015)

3Po47

SYNTÉZA FORCYKLAMENALDEHYDU A JEHO HYDROGENACE S VYUŽITÍM Pd KATALYZÁTORŮ

Eva Vrbková¹, Eliška Vyskočilová¹, Martina Votroubková¹, Martin Zapletal¹, Libor Červený¹

¹Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha, eva.vrbkova@vscht.cz

Cyklamenaldehyd (2-methyl-3-(4-isopropylfenyl)propanal) je žádaná vonná látka s květinovou vůní připomínající brambořík. Tato látka je připravována dvoukrokovou syntézou – aldolovou kondenzací 4-isopropylbenzaldehydu s propanalem poskytující forcyklamenaldehyd (2-methyl-3-(4-isopropylfenyl)prop-2-enal), který je

následně hydrogenován na žádaný cyklamenaldehyd.

V prvním kroku byly testovány podmínky přípravy forcyklamenaldehydu – množství a typ katalyzátoru (methanolát sodný, hydroxid draselný), molární poměr reaktantů (4-isopropylbenzaldehyd:propanal 1:1-5), dávkování propanalu do reakční směsi, teplota (25-60 °C) a druh rozpouštědla. Optimalizací reakčních podmínek bylo dosaženo 90 % konverze 4-isopropylbenzaldehydu a 92 % selektivity na žádaný forcyklamenaldehyd. Forcyklamenaldehyd byl následně izolován rektifikací (čistota 97 %) a hydrogenován s využitím Pd-MCM katalyzátorů.

Při přípravě Pd-MCM katalyzátorů byl sledován vliv podmínek přípravy katalyzátoru. Byl testován vliv množství katalyzátoru, teploty (20-60 °C) a tlaku (1-4 MPa) na průběh hydrogenace. Následně bylo také provedeno porovnání s komerčními Pd a Pt katalyzátory. Selektivity na žádaný cyklamenaldehyd se pohybovaly kolem 30 %.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č.20/2015)

3Po48

SYNTHESIS OF 5-SUBSTITUTED 4-HYDROXYISOXAZOLIDINES VIA „ISOXAZOLIDINYL EPOXIDES“

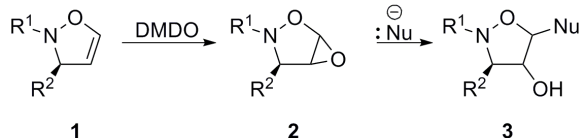
Ondrej Záborský¹, Róbert Fischer¹

¹Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava, Slovak Republic, ondrisko712@gmail.com

4,5-Unsubstituted 2,3-dihydroisoxazoles are very good building blocks in the synthesis of various 4,5-substituted isoxazolidines [1]. Non-racemic 2,3-dihydroisoxazoles **1** with carbamoyl protecting group at the nitrogen represent a new type of heterocycles which have not been studied sufficiently to date [2]. The presence of electron withdrawing group not only prevents side reactions of the nitrogen itself, but also has an impact on the reactivity of C-4/C-5 double bond [3].

At the beginning, we focused our attention on the preparation of 5-cyano-4-hydroxyisoxazolidines due to high synthetic versatility of the nitrile group. Our attempts to prepare *in situ* generated epoxides followed by the subsequent opening

with cyanide anion failed. On the other hand, we were able to isolate stable “isoxazolidinyl epoxides” **2** without any signs of the corresponding diols. These facts led us to use epoxides **2** in the reactions with various nucleophiles, in order to prepare desired 5-substituted 4-hydroxyisoxazolidines **3**. The results concerning their reactivity and diastereoselectivity will be presented.



$\text{R}^1 = \text{Boc, Cbz}$
 $\text{R}^2 = n\text{-Pr, Ph, CO}_2\text{Et}$

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] Daniela Beňadiková, Júlia Čurillová, Tomáš Lacek, Erik Rakovský, Ján Moncol', Jana Doháňošová, Róbert Fischer: *Tetrahedron* **70**, 5585 (2014).
- [2] Ondrej Záborský, Michal Šoral, Róbert Fischer: *Tetrahedron Lett.* **56**, 2155 (2015).
- [3] Ondrej Záborský, Tomáš Malatinský, Róbert Fischer, Ľubor Fišera: XXXIst Advances in Organic Chemistry Conference, Smolenice, Book of Abstracts, ISBN 978-80-970648-5-3. S. 83 (2014).

3Po49

SYNTEZA NOVÝCH DERIVÁTŮ TRILOBOLIDU

Tomáš Zimmermann¹, Pavel Drašar^{1*}

Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6 Dejvice,
 tomaszimmermann6@gmail.com.

Trilobolid (Tb) je seskviterpenový lakton izolovaný z *Laser trilobum* (L.) Borkh. U Tb a ďalších látok označovaných ako thapsigarginy bola zistená schopnosť kompetitívne inhibovať Ca^{2+} ATPasovou aktivitu sarco/endoplazmatického retikula (SERCA) [1]. Inhibícia SERCA a zvýšenie cytosolickej koncentrácie Ca^{2+} môže viesť až k apoptóze. Tb rovnako vykazuje významné imunostimulačné vlastnosti. Spúšťa expresiu interferonu- γ , ktorý sa podieľa na imunitnej odpovedi organizmu pri virových infekciách, a taktiež produkciu signálnej molekuly NO[2].

Byl pripraven konjugát 7- α -alkylestradiol – Tb s potenciálnou duálnou antiestrogénou a

proapoptotickou aktivitou. Antiestrogénna časť bola pripravená 6 syntetickými krokmi z estradiolu. Tb bol po pripojení azid-PEG-4 mostíka do polohy O-8 spojený s antiestrogénom CuAAC click reakciou. Tento produkt bude následne testovaný *in vitro*.

- [1] D.P. Drew, N. Krichau, K. Reichwald, H.T. Simonsen, *Phytochem. Rev.*, **8** (2009) 581-599.
- [2] E. Kmonickova, J. Harmatha, K. Vokac, P. Kostecka, H. Farghali, Z. Zidek, *Fitoterapia*, **81** (2010) 1213-1219.

3Po50

FUNKCIONALIZOVANÉ UHLÍKOVÉ NANOČÁSTICE PRO MEDICÍNSKÉ APLIKACE

Pavlna Žáková¹, Zdeňka Kolská², Jindřich Leitner¹, Václav Švorčík¹

¹ Ústav inženýrství pevných látek, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28, Praha 6,

pavlna.zakova@vscht.cz

² Přírodovědecká fakulta, Ústecké materiálové centrum, Univerzita J. E. Purkyně, České Mládeže 8, 400 96, Ústí nad Labem

Uhlíkové nanostruktury patří díky svým unikátním vlastnostem mezi jedny z nejvíce zkoumaných materiálů dnešní doby. Jejich výzkum je rozšířen zejména v oblasti medicínských aplikací. V této práci bylo funkcionizací připraveno pět typů amid-amin uhlíkových nanočástic. Připravené nanočástice byly charakterizovány několika analytickými metodami. Naroubování aminů na uhlíkové nanočástice bylo ověřeno rentgenovou fotoelektronovou spektroskopií, organickou elementární analýzou a elektrokinetickou analýzou. Velikost a morfologie nanočástic byla studována transmisí elektronovou mikroskopií. Porozita a velikost povrchu nanočástic byla stanovena analýzou podle Brunauer–Emmett–Teller. Tepelná stabilita nanočástic byla stanovena diferenční skenovací kalorimetrií. Množství navázaných aminů na povrch uhlíkové nanočástice závisí především na sterických vlastnostech daných aminů. Po navázání aminů na povrch uhlíkových částic dochází k výraznému poklesu velikosti povrchu a objemu porů nanočástic. Biokompatibilita vybraných typů funkcionizovaných nanočástic byla stanovena *in vitro* studiem adheze a proliferace hladkých svalových buněk z aorty potkana (VSMC). Studium biokompatibility bylo provedeno na substrátech plazmaticky aktivovaného vysokohustotního polyethylenu na který byly

funkcionalizované uhlíkové nanočástice navázány. Z výsledků je zřejmé, že uhlíkové nanočástice podporují adhezi a proliferaci VSMC buněk.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č.20/2015) a projektu GAČR 108/12/1168.

POSTERY - SEKCIA 4 VYUČOVANIE A HISTÓRIA CHÉMIE

4Po01

**INOVACE STUDIJNÍCH PŘEDMĚTŮ
INTERMEDIÁTY CHEMICKÝCH VÝROB
A VÝROBA LÉČIV V MAGISTERSKÉM
STUPNI STUDIA SPECIALIZACE
TECHNOLOGIE ORGANICKÝCH
SPECIALIT V RÁMCI PROJEKTU
IRS2015/034.**

Jan Dušek¹, Aleš Imramovský¹, Karel Pauk¹

¹ *Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Ústav organické chemie a technologie, Studentská 573, 532 10 Pardubice, jan.dusek87@gmail.com, <http://imramovsky.upce.cz/>*

Projekt se zabývá inovací povinně volitelných předmětů Intermediáty chemických výrob (UOCHT/C564) a Výroba léčiv (UOCHT/190) v akreditovaném studijním oboru navazujícího magisterského studijního programu Chemie a technologie materiálů, specializace Technologie organických specialit.

Projekt si klade za cíl změnit pojetí jednotlivých předmětů tak, aby byl jejich obsah více zaměřen na současnou praxi a předal potřebné teoretické i praktické znalosti absolventům - budoucím organickým technologům a výzkumným pracovníkům. Studenti budou v rámci seminářů vypracovávat laboratorní a výzkumné zprávy, případně standardní operační postupy.

Výstupem projektu bude přepracování konceptu zmíněných předmětů, v návaznosti na tyto změny budou odpovídajícím způsobem změněny sylaby předmětů. Dále budou vytvořeny přednášky, studijní materiály a další opory pro studenty. Výstupem projektu bude mimo jiné i PC pracoviště s dostupností všech elektronických zdrojů Univerzity Pardubice. Knihovní fond bude obohacen o klíčové monografie a další užitečné publikace z oblasti organických intermediátů a výroby a technologie léčiv.

Absolventi akreditovaného magisterského studijního programu budou díky svým teoretickým znalostem a odborným dovednostem rychleji začlenitelní do povinností organických technologů resp. výzkumných pracovníků. Sekundárně tím dojde také ke zvýšení konkurenceschopnosti Fakulty chemicko-technologické Univerzity Pardubice v otevřeném vzdělávacím prostoru a ke zvýšení prestiže celého vzdělávacího procesu Univerzity Pardubice.

Řešitelský kolektiv by na tomto místě rád poděkoval za finanční podporu projektu Interní rozvojové soutěže IRS2015/034, poskytovateli dotace Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy a také Univerzitě Pardubice.

POSTERY - SEKCIA 5

POTRAVINÁRSTVO, ŽIVOTNÉ PROSTREDIE A BIOTECHNOLÓGIA

5Po01

CÍLENÝ TRANSPORT LÉČIV POMOCÍ POKROČILÝCH NANOTECHNOLÓGIÍ

Ingrid Brezániová¹, Vladimír Král¹, Zulfiya Černochová², Martin Hrubý²,

¹ *Fakulta chemicko-inženýrská, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6*

² *Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6*

Polymerní nanočástice jako nosiče léčiv jsou v současnosti stále více studovány v kontextu vývoje nových terapeutických systémů pro cílenou dopravu léčiv, řízené uvolňování, subcelulární velikost a biokompatibilitu s tkání a buňkami. Největší pozornost se zaměřuje na vývoj nosičů kancerostatik a to z důvodu vysoké společenské závažnosti nádorových onemocnění. Stále rostoucí význam má fotodynamická terapie (PDT) pro léčbu určitých, především kožních nádorů. V poslední době je mezi nejvíce PDT používanými fotosenzitizéry Foscan® (temoporfin). Je netoxický, stabilní a má schopnost se selektivně akumulovat v nádorových tkáních, což umožňuje jeho využití při fotodynamické terapii.

Byla testována příprava a charakterizace nových biodegradovatelných nanočástic na bázi samospořádaného (angl. self-assembly) chitosanu a nízkomolekulárního oligosacharidu chitosan laktátu pomocí iontové gelace. Tvorba gelu byla zajištěna interakcí chitosanu s hydrofilními protiionty alginátu sodného, co umožňuje širokou škálu aplikací, jako je enkapsulace léčiv. Pro tyto účely jsme si jako aktivní farmaceutickou látku zvolili temoporfin. Modifikované nanosystémy byly stabilní při pH = 7,4. Velikost částic (D_H , hydrodynamický průměr), distribuce velikosti a zeta potenciál polyelektrolytových komplexů byli stanoveni pomocí dynamického rozptylu světla (Zetasizer Nano ZS, Malvern) a transmisí elektronové mikroskopie (TEM Tecnai G2 Spirit Twin 12 (FEI, Česká republika)). Bylo zjištěno, že velikost a distribuce velikosti částic nanosystému závisí na jejich koncentraci, vzájemných poměrech, pořadí

přidávání a pH. Velikost (d , průměr) jednotlivých nanočástic byl $d < 200$ nm, měřeno pomocí TEM. V případě chitosanu, byl $D_H < 400$ nm, a v případě nízkomolekulárního chitosan laktátu $D_H < 650$ nm, měřeno pomocí dynamického rozptylu světla, což je nad požadovanou velikost < 200 nm. Naše experimenty ukázaly, že testované vzorky jsou více méně homogenní, i když některé mikrofotografie ukazují „core-shell“ strukturu. Tyto stabilní biodegradovatelné samospořádané polyplexové nanočástice mohou najít uplatnění ve fotodynamické terapii po lokální aplikaci nebo po intraperitonální aplikaci ve fotodynamické terapii metastáz diseminovaných v dutině břišní.

Autoři děkují za finanční podporu Vysoké školy chemicko-technologické v Praze (grant č. AI_FCHI_2014_003); Akademii věd České republiky (grant č. M200501201), Grantové agentuře České republiky (grant č. 13-08336S), Ministerstvu Průmyslu a obchodu České republiky (grant č. FR-TI4/625) a Agentuře zdravotnického výzkumu (grant č. 15-25781A).

5Po02

HODNOCENÍ JADER PRO VÝVOJ PELET S ŘÍZENÝM UVOLŇOVÁNÍM GLUKÓZY K PREVENCI HYPOGLYKÉMIE

Sylvie Pavlovská¹, Aleš Franc¹, Jan Muselík¹, Dana Sabadková¹, Pavlína Kopecká¹, David Neumann²

¹ *Ústav technologie léků, Farmaceutická fakulta, Veterinární a farmaceutická univerzita Brno, Palackého tř. 1/3, 612 42 Brno, Česká republika, franca@vfu.cz*

² *Dětská klinika, Fakultní nemocnice Hradec Králové, Sokolská 581, 500 12 Hradec Králové, Česká republika*

Diabetes mellitus provází několik závažných komplikací, jednou z nich jsou hypoglykemické stavy pacientů užívajících insulin nebo perorální antidiabetika. Jako vhodná léková forma pro řešení tohoto problému byly vybrány pelety s řízeným uvolňováním glukózy, které by bylo možno pacientům podávat ve směsi s potravou nebo tekutinami. K tomuto účelu byla navržena peletová jádra o třech různých velikostech (0,6; 0,8; 1,0 mm) a čtyřech různých složeních [1, 2]. V jádrech je obsaženo 75 % nebo 80 % glukózy a dále jedna z osmoticky aktivních látek: kroskarmelóza sodná sůl (ADS), Avicel RC 591 (RC), polyethylenglykol 6000 (PEG), karboxymethylškrob sodná sůl (CMS). Jádra byla připravena metodou extruze – sféronizace a následně potažena polopropustnou membránou z ethylcelulosity pro zajištění uvolňování léčiva v požadovaném čase. Tato práce je zaměřena na

hodnocení kvality peletových jader. Cílem bylo pomocí základních i vícerozměrných statistických metod zhodnotit vlastnosti peletových jader a dále zjistit vliv jednotlivých proměnných na odlišení jader podle velikosti, případně složení. Na základě stanovených technologických parametrů (tokové a mechanické vlastnosti, sféricita, aspektový poměr) bylo potvrzeno, že peletová jádra mají vyhovující vlastnosti. Všechny z diskutovaných vzorků se proto jeví jako vhodné pro potažení a optimalizaci množství potahu prostřednictvím disolučních zkoušek.

Tato práce vznikla v rámci projektu IGA MZ č. 14479/2013, Příprava lékové formy s řízeným uvolňováním glukosy k prevenci hypoglykemických stavů.

- [1] Franc A et al. Formulation of cores for the controlled release of glucose for prevention of hypoglycemia in diabetes patients. *Ceska Slov Farm.* 2014;63:206–212.
- [2] Franc A et al. Preparation of pellets with controlled release of glucose as prevention of hypoglycaemia in paediatric patients. *Eur J Pharm Sci.* 2015. (v tisku)

5Po03

VÝVOJ PELIET S ONESKORENÝM UVOĽŇOVANÍM SACHARIDU K PREVENCIÍ HYPOGLYKÉMIE

Dana Sabadková¹, Aleš Franc¹, Jan Muselík¹, Pavlína Kopecká¹, Sylvie Pavloková¹, David Neumann²

¹ Ústav technologie léků, Farmaceutická fakulta, Veterinární a farmaceutická univerzita Brno, Palackého tř. 1/3, 612 42 Brno, franca@vfu.cz

² Dětská klinika, Fakultní nemocnice Hradec Králové, Sokolská 581, 500 05 Hradec Králové

Hypoglykémia vzniká pri neprimeranom pomere medzi aplikovaným inzulínom, výdajom energie a množstvom skonzumovaných sacharidov. Väčšinu hypoglykemických príhod je možné odhadnúť, ale niektoré sa dajú vyriešiť len ťažko. Cieľom práce bol vývoj peliet s oneskoreným uvoľňovaním glukózy. Liekovú formu tvorí sférické jadro s obsahom glukózy a osmoticky aktívnej látky, obalené semipermeabilnou membránou. Vo vodnom prostredí gastrointestinálneho traktu pelety zväčšujú svoj objem, čo vedie k prasknutiu membrány a oneskorenému uvoľneniu glukózy. Za vhodné časy uvoľňovania je možné podľa diabetologickej praxe považovať časy 2, 3 a 4 hodiny [1]. Množstvo glukózy v jednej dávke predstavuje 10 gramov, čím dôjde k zaručeniu bezpečnej hladiny krvného cukru po potrebnú dobu bez narušenia denného režimu diabetika. Za účelom

ľahkej aplikácie najmä deťom je potrebné, aby pelety mali čo najmenšiu veľkosť [2]. Doteraz sa podarilo pripraviť pelety s priemerom jadra 1 mm, ktorí uvoľňovali glukózu s potrebným oneskorením [3]. V súčasnom výskume bola veľkosť jadier znížená na 0,8 mm. Jadrá boli pripravené metódou extrúzie sféronizácie a potiahnuté fluidným nástrekom vodnou disperziou etylcelulózy. Najlepším sa ukázalo zloženie s obsahom 80 % glukózy v kombinácii s karboxymethylškrobom a 50% potažom. Disolučným testom bolo zistené, že uvoľňovanie glukózy začalo po 360 min, čo je v súlade s odporúčanými časmi oneskorenia.

Táto práca vznikla v rámci projektu IGA MZ č. 14479/2013, Příprava liekové formy s řízeným uvolňováním glukózy na prevenciu hypoglykemických stavov.

- [1] Franc A et al. Farmaceutická kompozice s řízeným uvolňováním metabolicky aktivního cukru. Patentová přihláška. 2014. WO 2014180453 A1.
- [2] Franc A et al. Formulation of cores for the controlled release of glucose for prevention of hypoglycemia in diabetes patients. *Ceska Slov Farm.* 2014;63:206–212.
- [3] Franc A et al. Preparation of pellets with controlled release of glucose as prevention of hypoglycaemia in paediatric patients. *Eur J Pharm Sci.* 2015. (v tlači)

5Po04

VYUŽITIE MODIFIKOVANÝCH ZEOLITOV NA FOTOKATALYTICKÚ REDUKCIU CO₂

Jana Jokrllová¹, Gabriel Čík¹, František Šeršeň², Helena Švajdlenková³, Miroslava Lukešová³

¹ Oddelenie environmentálneho inžinierstva, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovenská republika,

jana.jokrllová@stuba.sk

² Chemický ústav, Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského, Mlynská dolina, Ilkovičova ulica č. 6, 842 15 Bratislava 4, Slovenská republika

³ Ústav polymérov, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava 4, Slovenská republika

V posledných desaťročiach môžeme pozorovať nárast priemerných ročných teplôt na Zemi. Za jeden z hlavných dôvodov globálneho otepľovania je považovaný vzostupný charakter koncentrácie oxidu uhličitého v atmosfére (máj 2015 - 403.94 ppm). Najväčšie množstvá emisií CO₂ pochádzajú zo spaľovania fosílnych palív, až 40% z celkového množstva. CO₂ môže však

služiť aj ako surovina na výrobu využiteľných organických zlúčenín. Fotoredukcia oxidu uhličitého predstavuje efektívny proces konverzie slnečnej energie na zhodnotiteľné zlúčeniny ako H_2 , metanol a ostatné.

Fotokatalytická metóda využíva na redukciu CO_2 polovodiče, na povrchu ktorých sa vplyvom svetelného žiarenia iniciujú potrebné reakcie. Ako katalyzátor tejto reakcie bol najviac testovaný TiO_2 , avšak vyskytol sa tu problém s rekombináciou párov elektrón – diera. Ďalšou nevýhodou je schopnosť systému pracovať iba pri použití UV žiarenia.

V našej štúdii sme pripravili štyri heterogénne katalyzátory s oligomérmí tiofenu (organický polovodič) oxidatívnou polymerizáciou tiofenu s $FeCl_3$. Fotokatalyzátor Fe-ZSM-5-PT-ULT sme testovali na schopnosť redukovat' CO_2 vo vode pod VIS žiarením. Po reakcii sa reakčná zmes analyzovala plynovou chromatografiou (Head Space GC-MS). V reakčnej zmesi dochádza k vzniku organických zlúčenín. Pre objasnenie mechanizmu redukcie CO_2 sme uskutočnili aj EPR merania z dôvodu detekcie prítomnosti reaktívnych radikálových medziproduktov v reakčnom systéme.

5Po05

SELECTED SPECIAL APPLICATIONS OF POTENTIOMETRY OF METALS DETERMINATION IN AQUEOUS SOLUTIONS

Abraham Kabutey, Ladislav Novotný, Veronika Kočanová, Renáta Petránková, Petr Langášek, Edwin Wallace, Libor Dušek

Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Studentská 573, 532 10 Pardubice, nvt.l@seznam.cz

Special analytical utilization of potentiometric measurements using ion-selective or amalgam electrodes for the determination of selected metals such as Copper, Silver, Zinc or Cadmium in aqueous solutions were presented. Electroanalytical techniques based on potentiometric identification using ion-selective or special electrodes [1,2] provide valuable results even under quite common conditions [3]. The measurements were done in arrangement [2] comprising a potentiometric block of polarograph PA4 (Laboratorní přístroje, Praha) with a modified impedance input. Experimental arrangement comprised a stand of the Eco-Tribo polarograph (ECO-TREND PLUS, Praha). Air

oxygen dissolved in solutions was removed by bubbling out of nitrogen for a period of about 6 minutes. Cylindrical or conical tip of the silver disc or silver amalgam electrodes/sensors in solutions containing corresponding ions or colloids were applied. The effect of their mechanical renewal was tested, as well.

The potentiometric measurements confirmed a significant influence of air oxygen on the values of the plotted potential. Some measurements required to work under the nitrogen atmosphere. Application of bubbling out the measured solution by N_2 indicated better sensitivity and reproducibility of the measurements. More sensitive results could be achieved if the electrode surfaces were renewed periodically.

This work was supported by Ministry of Education, Youth and Sports No. SGSFChT_2015006.

- [1] Ladislav Novotný, Renáta Petránková, Abraham Kabutey: ChemZi 9/1, 231 (2013)
- [2] Ladislav Novotný: Úřad průmyslového vlastnictví Praha, PV/PUV 2006-600/30527 (2006)
- [3] Petr Langášek, Chemie v JE VVER 440 (Machař L., ed.), kap. 1., Sekce jaderných elektráren ČEZ, Praha (1999)

5Po06

VYUŽITÍ REHYDRATOVANÝCH KAOLÍNŮ PRO DEKONTAMINACI ARSENU, ANTIMONU A SELENU

Miloslav Lhotka¹, Barbora Doušová², Vladimír Machovič³

¹VŠCHT Praha, Ústav anorganické technologie, Technická 5, Praha 6-Dejvice, 166 28, Tel.: +420220445019, e-mail:

Miloslav.Lhotka@vscht.cz

²VŠCHT Praha, Ústav chemie pevných látek, Technická 5, Praha 6-Dejvice, 166 28

³VŠCHT Praha, Centrální laboratoře, Technická 5, Praha 6-Dejvice, 166 28

Jílové materiály se velmi často využívají jako selektivní sorbenty pro dekontaminaci zdraví škodlivých látek. Hydrotermální úpravou lze kaolin transformovat na semi-krystalický (velmi reaktivní) metakaolin a jeho rehydratací lze opět vytvořit kaolin s extrémně zvýšeným specifickým povrchem [1,2]. Metoda rehydratace metakaolinu tedy otevírá další možnosti využití druhořadých nebo odpadních jílu na přípravu těchto efektivních anionaktivních sorbentů. Přírodní kaolin byl kalcinován na metakaolin při teplotě 650°C (dehydroxylace) a poté rehydratován v autoklávu při různých reakčních podmínkách (teplota, čas). Pro zlepšení sorpčních vlastností pro aniontové částice byl vzniklý sorbent

modifikován sloučeninami železa. Připravené sorbenty byly využity pro odstranění arsenu, selenu a antimonu z modelových vodných roztoků simulující reálné prostředí [3]. Nejlepší sorpční vlastnosti byly pozorovány na vzorku kaolinu rehydratovaného po dobu 7 dnů při teplotě 175°C. Adsorpční parametry pro As / Se / Sb oxyanionty byly vypočteny podle izotermie Langmuira. Afinita adsorpce toxických oxyaniontů se snižuje v pořadí Sb (V) > As (V) > Se (IV) > As (III). Vypočtené teoretické adsorpční kapacity se pohybují v rozmezí od 0,08 do 0,16 mmol.g⁻¹. Předmětem dalšího výzkumu bude adsorpce toxických prvků z reálných roztoků.

Tento výzkum je podporován projektem č. 13-24155S (Grantová agentura ČR).

- [1] Rocha, J., Adams, J.M. & Klinowski J. 1990. The Rehydration of Metakaolinite to Kaolinite: Evidence from Solid-State NMR and Cognate techniques. *J. Solid State Chem.* 89: 260-274.
- [2] Lhotka, M., Doušová, B., & Machovič, V. 2012. Preparation of modified sorbents from rehydrated clay minerals. *Clay Miner.* 47: 251-258
- [3] Doušová, B., Fuitová, L., Grygar, T., Machovič, V., Koloušek, D., Herzogová, L. & Lhotka, M. 2009. Modified aluminosilicates as low-cost sorbents of As(III) from anoxic groundwater. *J. Hazard. Mater.* 165: 134-140.

5Po07

ALTERNATIVNÍ PODMÍNKY POTENCIOMETRICKÉHO SLEDOVÁNÍ VÝROBY ČISTÝCH VOD ZEJM. PRO ENERGETIKU POMOCÍ AMALGAMOVÉ ELEKTRODY

Ladislav Novotný, Petr Langášek, Renáta Petráňková, Veronika Kočanová, Abraham Kabutey, Libor Dušek

Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Studentská 573, 532 10 Pardubice, nvt.l@seznam.cz

Výroba speciálních čistých vod zejm. pro energetiku představuje jeden z nejvýznamnějších vodohospodářských i příslušných technologických úkolů [1]. Často se při ní osvědčuje použití iontoměničů, ultrafiltrace nebo nanofiltrace. Jde přitom o uplatnění několika na sebe navazujících operací, jejichž výsledkem je čistá voda připravená pro dané použití. Příkladem toho je výroba demivody s využitím předběžných úprav dekantací, koagulací a filtrací, s následnými úpravami katexem a anexem. Přitom se voda postupně deionizuje a zbavuje i množství organických složek. Vedle toho je nutno

pamatovat i na postupnou degradaci katexů i anexů nebo důsledky interakcí na jejich povrchu.

Kontrola správného průběhu sekvence zmíněných technologických kroků se dosud provádí konduktometricky. Předběžné výsledky však ukázaly na nadějnou možnost doplňkové či alternativní kontroly s využitím [2] potenciometrie na k tomu připravené stříbrné amalgamové elektrodě.

Slibná korelace mezi měřením vodivosti κ a potenciálem E vs. Ag/AgCl dala podnět k dalšímu studiu a ověřování možnosti doplňkového uplatnění tohoto typu potenciometrických měření, jejich využití k periodickému nebo občasnému zdvojení kontroly apod. Hodnoty korelačního koeficientu mezi E a κ se při opakovaných měřeních pohybovaly okolo $R = 0,963$. Předběžně byla korelace úspěšně testována i na případu u nánátriku (N) a permeátu (P) při uplatnění čištění vody obsahující ZnSO₄ nanofiltrací, s korelačním koeficientem $R = 0,955$.

Tato práce vznikla s podporou projektů MSM č. 0021627502 a SGSFChT_2015006.

- [1] Langášek P, Chemie v JE VVER 440 (Machař L., ed.), kap. 1., Sekce jaderných elektráren ČEZ, Praha (1999)
- [2] Ladislav Novotný: Úřad průmyslového vlastnictví Praha, PV/PUV 2006-600/30527 (2006)

5Po08

BIOLOGICKÉ ODBOURÁVÁNÍ KYANIDŮ Z MODELOVÝCH ODPADNÍCH VOD

Jiří Palarčík¹, Lucie Pešková¹, Jana Muselíková¹, Radek Sleha²

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

² Katedra biologických a biochemických věd, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice

Kyanidy mohou být přítomny v životním prostředí a odpadních vodách jako volné (HCN, CN⁻, NaCN), ve formě kovových komplexů, kyanatanů nebo nitrilů. Kyanidy vyskytující se v životním prostředí jsou pouze v minimálním množství přírodního původu a to jako produkty některých bakterií, řas, hub a rostlin. Většina kyanidů je původu antropogenního. Hlavní zdroje znečištění jsou technologie spojené s tepelným zpracováním uhlí, povrchovou a tepelnou úpravou kovů, fotografický průmysl a některé organické syntézy. Kyanidy (obzvláště ty jednoduché) patří mezi velice toxické látky, které

ve vodním prostředí působí nejen na ryby, ale také na ostatní vodní organismy. To je důvod, proč je potřeba v co největší míře zabránit jejich úniku do jednotlivých složek životního prostředí, zvláště pak do vody. K tomu se velice často využívají metody chemické, byť zvláště pak v poslední době roste tlak na využívání metod biologických. Tato práce je zaměřena na zkoumání možnosti odstranění kyanidů z modelové odpadní vody bakteriemi *Alcaligenes faecalis*, *Klebsiella oxytoca*, *Escherichia coli* a *Pseudomonas aeruginosa*. Byl také zkoumán vliv použitého organického substrátu a počáteční koncentrace kyanidů na účinnost jejich odstranění.

Autoři děkují za finanční podporu Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy ČR (SGSFCHT_20015006).

- [1] Ebbs S.: Biological degradation of cyanide compounds. *Current Opinion in Biotechnology*, 2004, 15, s. 231 – 236.
- [2] Pitter P.: *Hydrochemie*, Vydavatelství VŠCHT Praha, Praha, 2009.
- [3] Chen C.Y., Kao C.M., Chen S.C.: Application of *Klebsiella oxytoca* immobilized cells on the treatment of cyanide wastewater. *Chemosphere*, 2008, 71, s. 133 – 139.

V naší studii jsme se zaměřili na vývoj jednoduché a rychlé metody na stanovení alloxanu pomocí kapilární zónové elektroforézy (CZE). Spolu s alloxanem byly při analýze dále separovány kyselina barbiturová a kyselina močová, možné prekurzory alloxanu. Jako základní elektrolyt byl použit 50 mM borát/NaOH a byly optimalizovány podmínky separace (pH, iontová síla). Jako nejlepší podmínky pro separaci všech 3 látek byl zvolen systém 50 mM borát/NaOH pH 8,0, kdy bylo dosaženo separace do 2 minut při aplikovaném napětí 20 kV. Zvolená metoda byla následně aplikována na vzorky bělené a nebělené mouky.

Autoři děkují projektu MZ ČR –RVO-FNOs/ 2015 a projektu MŠMT (NPU LO 1305) za finanční podporu výzkumu.

- [1] S. Lenzen: *Diabetol.* 51, 216 (2011).
- [2] A. Mrozikiewicz, D. Kielezewska-Mrozikiewicz, Z. Lowicki, E. Chmara, K. Korzeniowska: *Diabetol. Acta* 31, 236 (1994).
- [3] T. Szkudelski: *Physiol. Res.* 50, 537 (2001).

5Po09

ANALÝZA ALLOXANU KAPILÁRNÍ ZÓNOVOU ELEKTROFORÉZOU

Jana Horská¹, Kateřina Vítková², Jana Jurčíková², Václav Procházka², Andrea Šebestová¹, Jan Petr¹

¹ *Katedra analytické chemie, Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 77146, Olomouc*

² *Fakultní nemocnice Ostrava, 17. listopadu 1790/5, 708 52 Ostrava – Poruba*

Alloxan, cytotoxická obdoba glukózy, [1] v posledních letech upoutal pozornost v oblasti výzkumu diabetu. U zvířat je schopný vyvolat stav experimentálního diabetu mellitus nekrozou specifických pankreatických beta – buněk Langerhansových ostrůvků, v nichž se hromadí. Důsledkem toho buňky nejsou schopné produkovat do krve hormon inzulin. Příznaky vyvolané cukrovkou jsou obdobné jako u diabetu 1. typu u lidí. [2, 3]

POSTERY - SEKCIA 6 CHEMPROGRESS

6Po01

VODIVÉ NANOVLÁKENNÉ KOMPOZITY PRIPRAVENÉ ELEKTROSTATICKÝM ZVLÁKŇOVANÍM

Eliška Číková¹, Matej Mičušík¹, Alena Šišková¹,
Pavol Fedorko², Mária Omastová¹

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

² Odeľenie chemickej fyziky, Fakulta chemických a
potravinárskych technológií, STU v Bratislave,
Radlinského 9, 812 37 Bratislava
E-mail: eliska.cikova@savba.sk

Vodivé polyméry sa používajú v širokej škále aplikácií vrátane biologických a chemických senzorov, transparentných elektronických zariadení, a iných. Ich výhodou oproti kovom je jednoduchšie spracovanie, vyššia flexibilita a nižšia hmotnosť. Medzi najštudovanejšie patria polypyrol (PPy), polyanilín, polytiofén a ich deriváty. Rastúci dopyt po nových vodivých materiáloch je preto, že môžu nájsť uplatnenie v nových oblastiach, ako sú organická elektronika alebo medicína [1].

Polykaprolaktón (PCL) je hydrofóbny, semikryštalický polymér. Používa sa pre jeho dobré mechanické vlastnosti, dobrú rozpustnosť, navyše je biokompatibilný.

Pre prípravu elektrostaticky zvlákneneho PCL bola vypracovaná štúdia vplyvov základných parametrov, napr. koncentrácie polyméru, použitého napätia, a vzdialenosti medzi špičkou ihly a kolektorom [2]. Ako rozpúšťadla boli použité: dimetylformamid (DMF), chloroform, dichlórmetán (DCM) a DMF/DCM (pomer 1: 1). Pripravené boli roztoky PCL s koncentráciou od 5 do 15 hm.%. Vhodnými pre ďalšiu modifikáciu s polypyrolom sa ukázali nanovlákná pripravené z 15 hm.% roztoku PCL pri použití DMF/DCM ako rozpúšťadla v pomere 1:1, s prietokom 0,5 ml/h a privedeným napätím 9 kV. Študovali sme vplyv podmienok polymerizácie pyrolu na kvalitu hĺbky prieniku vodivého polyméru do vlákien PCL a na výsledné elektrické vlastnosti pripravených nanovláknien. Rôzne analytické metódy napr. XPS, SEM boli použité na charakterizáciu morfológie a štruktúry pripraveného vlákenného kompozitu. Zaujímavé vlastnosti týchto kompozitov ich predurčujú ako

materiály pre biomedicínske aplikácie, ktoré plánujeme v budúcnosti študovať.

Podakovanie: Prácu finančne podporili projekty VEGA 2/0149/14, VEGA 1/0601/15 a projekt COST MP 1206.

Literatúra

- [1] Omastová M., Mičušík M.: Chemické listy, 66 (2012) 392-414.
- [2] Číková E., Šišková, A., Opálek A., Omastová M.: In Applications of Electrospinning in Composites, Nanofabrication, Food, Packaging, Pharma and Controlled Release: COST MP1206 Electrospinning : Novi Sad, Serbia, 25th-27th March 2015: Program and book of abstracts. 2015, p. 81.

6Po02

67. ZJAZD CHEMIKOV, 7. – 11. SEPTEMBER 2015, VYSOKÉ TATRY

Jozef Dámer¹, Berka Jan¹, Vít Jan¹

¹ Centrum výzkumu Řež s.r.o., Hlavní 130, 250 68
Husinec-Řež, Česká republika, jozef.damer@cvrez.cz

Helium je uvažované jako chladivo některých pokročilých jaderných reaktorů. Důvodem využití helia k tomuto účelu je především jeho chemická stálost, nereaktivnost s konstrukčními materiály a skutečnost, že při průchodu tohoto s aktivní zónou jaderného reaktoru nevznikají radioaktivní izotopy s dlouhým poločasem rozpadu. V plynném chladivu se ovšem vyskytují nečistoty – typicky CO, CO₂, H₂, H₂O, CH₄, O₂, N₂, které je nutné průběžně odstraňovat. Tyto postupy jsou experimentálně ověřovány v čistícím okruhu heliové smyčky HTHL v Řeži. V tomto případě bylo testováno odstraňování H₂ a CO pomocí oxidace v jednotce naplněné katalyzátorem na bázi CuO a adsorpce pomocí molekulových sít.

Oxidační schopnosti CuO byly testovány při několika teplotách na heliu s různými příměsemi. Finální oxidační produkty byly po stabilizaci složení plynu odstraněny na adsorbérech naplněnými molekulovými sítěmi na bázi zeolitů s velikostí pórů 5 Å. Při experimentech bylo dosaženo poměrně vysoké účinnosti konverze H₂ na H₂O a CO na CO₂ v oxidační jednotce, která byla součástí systému čištění helia. Stupeň konverze byl – dle očekávání – závislý na aktuální pracovní teplotě oxidační jednotky. V druhé části experimentálního provozu byly testovány různé sorpční náplně pro vysokotlakou adsorpci.

6Po03**BIOGLYCEROL PLATFORM**Alexander Kaszonyi, Magdaléna Štolcová

Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Joint Slovak-Hungarian Laboratory for Development of Catalyzed Chemical Processes of Biomass Utilization, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, alexander.kaszoniyi@stuba.sk

The biodiesel (FAME) boom in the last decade increased the global bioglycerol production from 0,7 mill. t/Y (2004) up to 2.5 mill. t/Y (2015). The overproduction of bioglycerol has led to lower glycerol prices, which initiated both the penetration of glycerol to products where it was not used due to high price, as well as new uses of glycerol as raw material for the production of value added chemicals. New chemical plants started to produce epichlorohydrin, propylene glycol, bio-methanol and acrylic acid from bioglycerol.

We are developing green technologies using bioglycerol for production of i) glycerol carbonate as nonvolatile solvent for Li ion batteries, gas separation membranes, humectant for cosmetics, etc., ii) coolant mixture based on propandiole, glycerol and acetol, iii) glyceric acid and tartronic acid mixture as oxygen scavenger for coolants, iv) glycerol ethers as solvents and fuel components. In all developed technologies we succeeded to get results, which are perspective for industrial application. For all technologies we looked for possibility to use cheap crude glycerol and developed economic technology for elimination of crude glycerol components which have negative effect on the given technology of bioglycerol utilization.

Acknowledgment

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-0133-11.

6Po04**ELEKTROCHEMICKÁ ALKALIZACE NEUTRÁLNÍCH ROZTOKŮ**Martin Paidar, Martin Roubalík

Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 25 Praha 6, martin.paidar@vscht.cz

V chemickém procesu je velmi často nutná úprava pH procesních roztoků. Nejčastěji používaný způsob je přidávek kyselin nebo hydroxidů. Úprav pH pomocí chemických látek

je vždy spojena s manipulací a dávkováním těchto látek. To zároveň vede i k nárůstu objemu upravovaného roztoku. Elegantní metodu úpravy pH bez přídavku chemických látek představuje elektrolytický rozklad vody. Vznik kyslíku na anodě je spojen s okyslením roztoku okolo anody. Analogicky vznik vodíku na katodě je spojen s alkalizací katodového roztoku. Protože proces okyselení a alkalizace probíhá současně, je třeba anodový a katodový prostor oddělit účinným separátorem. V rámci úpravy pH je tak možné zpracovávané technologické vody čerpat pouze kolem jedné elektrody, čímž dojde k požadované změně pH. Účinnost procesu je však ovlivněna především pronikáním protonů respektive hydroxidových iontů separátorem.

V rámci této práce byla srovnávána účinnost alkalizace neutrálního roztoku při použití iontově selektivní membrány a při použití inertní diafragmy. Z hlediska proudové účinnosti, se jako vhodnější separátor ukazuje iontově selektivní membrána, nicméně snáze u ní dochází k zanesení.

Poděkování: Tato práce vznikla za finanční podpory Technologické agentury ČR v rámci projektu č. TA04020939.

6Po05**POROVNÁNÍ PRŮBĚHŮ REAKCE VYBRANÝCH UHLIČITANOVÝCH SUROVIN VE ZŘEDĚNÝCH ROZTOCÍCH KYSELINY SÍROVÉ**Martin Pultar¹, Ivona Sedlářová¹, Jan Vídenský¹

¹Ústav anorganické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, Praha 6 – Dejvice, 166 28, Česká republika, e-mail: martin.pultar@vscht.cz

Reakce uhličitánových surovin ve zředěných roztocích minerálních kyselin spadají svou podstatou do oblasti heterogenních nekatalyzovaných reakcí, které nabízejí reálné aplikační možnosti v chemickém průmyslu. V prezentované práci jsou uvedeny výsledky úvodní kinetické studie vlivu reakčních podmínek (teplota, počáteční koncentrace kyseliny, intenzita míchání, velikost částic) na průběh reakce vybraných uhličitánových surovin s proměnným složením ve zředěných roztocích kyseliny sírové. Použité suroviny se lišily především zastoupením vápenaté a hořečnaté složky - od velmi čistého vápence (CaCO_3) až k dolomitu ($\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$). Reakční experimenty byly prováděny v míchaném polovsádkovém izotermním reaktoru a ke sledování průběhu

reakce byla využita metoda pH-stat titrace. Na základě změny pH (pokles koncentrace kyseliny sírové) vlivem probíhající reakce bylo automatickým titrátozem do reakční směsi dávkováno odpovídající množství koncentrovanější kyseliny tak, aby byla udržována stále stejná hodnota pH roztoku. Z údajů o přidaném objemu koncentrovanější kyseliny sírové v čase byly sestaveny časové závislosti stupně přeměny dané suroviny v konkrétních reakčních podmínkách. Pro charakterizaci a porovnání reakčních systémů byly stanoveny základní kinetické parametry. Získaná data byla zpracována podle modelové představy nezreagovaného jádra s využitím kinetické rovnice mocninného typu.

6Po06

EFFECT OF PREPARATION METHOD ON THE PROPERTIES OF PALLADIUM BISMUTH NANOPARTICLES STABILISED WITHIN POLYMERIC RESIN AS CATALYSTS FOR BIOGLYCEROL OXIDATION WITH MOLECULAR OXYGEN

Magdaléna Štolcová, Stanislav Vajíček, Alexander Kaszonyi

Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Joint Slovak-Hungarian Laboratory for Development of Catalyzed Chemical Processes of Biomass Utilization, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, magdalena.stolcova@stuba.sk

The recently developed biofuel manufacturing procedures from non-edible crops mostly cultivated on poor soil, from algae lipids, from animal or waste fats appear to be ethically acceptable towards the conversion of biomass to fuels and chemicals (as a second/third generation biofuels).

Catalysts containing palladium-bismuth nanoparticles stabilized within a commercial cross-linked functional polymer were synthesised and used to catalyse bioglycerol liquid phase oxidation with molecular oxygen under mild reaction conditions. The effects of the preparation methods of precursors and their reduction were studied. The precursors of the catalysts by direct ion-exchange reaction of the chloride form of resin with the PdCl_4^{2-} and BiCl_4^- anions were investigated in a time ranging from 0.5 -20 h. The reduction either by sodium borohydride or molecular hydrogen were undertaken. The

spectroscopic characterizations revealed that the ion-exchange reaction tends to reach a fast saturation and the reduction method significantly influences the size of Pd particles and the Pd -Bi surface configuration. The size of crystalline palladium particles differs negligibly by the variation of the metals loading. The catalytic results indicated that the oxidation of glycerol is structure sensitive. The oxidation products, glyceric acid and tartronic acid, are effective oxygen scavenger.

Acknowledgment

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-0133-11.

6Po07

VYUŽITÍ MEMBRÁNOVÉ SEPARACE PRO REGENERACI HÉLIA Z OCHRANNÉ OBÁLKY PLYNEM CHLAZENÉHO REAKTORU.

Jan Vít¹, Jan Berka¹

¹Centrum výzkumu Řež s.r.o., Husinec - Řež, čp. 130, 250 68 Řež, www.cvrez.cz

V současnosti jsou rozpracovány různé koncepty pokročilých jaderných reaktorů IV. generace. Plynem chlazené reaktory jsou zde zastoupeny v několika konceptech (GFR a VHTR), jejich společným znakem je funkce za vysokých teplot a tlaků a užití plynného hélia jako chladiva.

Hélium, jako vzácný plyn nereagující s konstrukčními materiály reaktoru a při nemožnosti jej aktivovat v aktivní zóně reaktoru, je vhodným chladivem pro vysokoteplotní reaktor pracující až při 900 °C. Nevýhody zde jsou vyšší spotřeba energie na cirkulaci chladiva, konstrukční náročnost na tlakové nádoby okruhu za vysokých teplot a reálná nedosažitelnost těsnosti primárního okruhu. Současné návrhy GFR počítají s uzavřením celého primárního okruhu do ochranné obálky s dusíkovou atmosférou, ze které by se unikající hélium separovalo a vrátilo zpět.

Jeden z konstrukčních návrhů pro separaci helia uniklého z GFR dnes počítá s použitím adsorpčních, případně destilačních technik. Cílem této práce bylo demonstrovat možnosti membránové separace hélia pro tyto aplikace testováním komerčně dostupné membrány se směsmi simulujícími atmosféru v ochranné obálce. Byla vybrána membrána určená pro výrobu dusíku ze vzduchu s předpokladem vhodných permeačních charakteristik i pro směs He v N₂.

Testy dokázaly, že běžně dostupné komerční membrány určené na výrobu dusíku ze vzduchu mají dostatečné vlastnosti i pro systémy separaci hélia pro GFR, jako i jejich časovou stálost.

Tato práce vznikla za finanční podpory projektu SUSEN CZ.1.05/2.1.00/03.0108, který je realizován v rámci Evropského fondu regionálního rozvoje (ERDF). Předložená práce vznikla také díky projektu TA ČR, programu alfa TA03020850.

AUTORSKÝ INDEX

A

Alberti M.....	134
Alekseeva E.....	140
Androvič L.....	140

B

Babjak M.....	150
Bajus M.....	62
Bald A.....	70, 113
Balzerová A.....	110
Baranyai Y.....	152
Baráth M.....	93
Barek J.....	111
Baťová J.....	86
Belický Š.....	59
Bella M.....	130
Berek D.....	148
Berka J.....	172, 174
Bertók T.....	59
Bílková D.....	141
Billík P.....	132
Bláhová L.....	105
Blahut J.....	125, 129
Blažková Z.....	102, 103, 104
Bleha R.....	100
Bober P.....	140
Borská K.....	83
Bösze S.....	152
Bouška M.....	122
Bouzek K.....	106, 107, 108, 109
Božek P.....	118
Brezániová I.....	167
Brož B.....	85
Brožek J.....	83
Budovská M.....	86
Burčová Z.....	100, 101, 102, 105
Bureš F.....	87, 147, 151, 161
Burketová L.....	100
Bužga M.....	70
Bystrický R.....	132
Bystroň T.....	106, 108

C

Caballero A.....	129
Cakl J.....	102, 104
Capek I.....	147
Čapek L.....	129
Capek P.....	145, 147, 162
Čaplovičová M.....	131
Čársky J.....	62
Cejpek K.....	97
Cepák V.....	145
Černá K.....	71
Černoch P.....	123
Černochová Z.....	167
Černošek Y.....	126, 128
Černošková E.....	126
Čertík M.....	105
Červený L.....	164
Červený V.....	119
Chaloupková Z.....	71
Chehimi M. M.....	156
Chmela Š.....	148
Chmelík J.....	139
Chodák I.....	156, 159
Chýlková J.....	66, 67
Cigán M.....	93
Čík G.....	168
Číková E.....	172
Císařová I.....	80, 128, 129
Coffey A.....	152
Conde J. E.....	113
Čonková M.....	161
Csöllei J.....	146
Csomorová K.....	149
Čtrnáctová H.....	95
Czaniková K.....	156

D

Dámer J.....	172
Danielik V.....	74, 127
Danko M.....	141
Datta K. K. R.....	75
Derco J.....	78
Dičáková Z.....	67
Dikošová L.....	144
Doháňošová J.....	88, 142

Donovalová J.....	93
Dostál L.....	81
Doušová B.....	169
Drabina P.....	89, 140
Drakselová M.....	107
Drašar P.....	165
Drašar P. B.....	150
Driguez P. A.....	112
Dušek J.....	166
Dušek L.....	103, 169, 170
Dvořák Z.....	146

E

Eckstein-Andicsová A.....	83
Economou A.....	111
Endlová L.....	114
Erben M.....	81
Erdelyi B.....	72
Erhartová L.....	143
Evghenia E.....	157

F

Fabišíková M.....	143
Fargašová A.....	71
Fedorko P.....	172
Fellner P.....	127
Filip J.....	59, 78
Filip L.....	110
Filippov S.....	73
Filo J.....	132
Fischer J.....	111
Fischer R.....	144, 154, 164
Fojta M.....	64
Franc A.....	167, 168
Furdíková K.....	69

G

Gálišová A.....	160
Ganajová M.....	95
Gáplovský A.....	93
Gáplovský M.....	93
Gawande M. B.....	75
Gembický M.....	79
Ginterová P.....	96
Girman V.....	72
Giurg A.....	108
Gonda J.....	89, 143, 158, 161, 162
Gončec T.....	144, 152
Gonzalez-Delacruz V. M.....	129

Gracza T.....	88, 150, 154
Gregor M.....	131
Gucký T.....	153
Gutwirthová V.....	125

H

Hájeková E.....	62
Hájková T.....	126
Hajtmánová K.....	113, 134
Halaj M.....	145
Halászová S.....	120
Halko R.....	118
Hallon L.....	97
Haluzík M.....	70
Hámpel A.....	113
Hanusek J.....	86, 89
Harmatha J.....	150
Harvanová.....	72
Havel J.....	113, 122, 134
Havelcová M.....	146
Havlíček D.....	81, 138
Havlík J.....	141
Havran L.....	64
Havránková E.....	146
Havrdová M.....	110
Hejdová M.....	126
Henke P.....	127
Herchel R.....	79
Hermann P.....	125, 133
Herová D.....	88, 160
Hirsch J.....	93
Hlaváčková K.....	160
Hlídková H.....	163
Hloušková Z.....	147
Hnát J.....	108
Holubová J.....	126
Honzíček J.....	81
Horská J.....	171
Horváth M.....	93
Hradilová Š.....	104
Hraniček J.....	111
Hrčková L.....	148
Hrdlovič P.....	141
Hricovíni M.....	112
Hricovíniová Z.....	148
Hrubý M.....	73, 82, 92, 123, 153, 158, 160, 163, 167
Hrvolová B.....	101
Hurný D.....	149
Hushegyi A.....	59
Hušková I.....	78

I

Imramovský A.	166
Imrich J.	61

J

Jaček M.	112
Jakl M.	116
Jaklová Dyrtrtová J.	116
Jakusová K.	93
Jampílek J.	144, 152
Janda T.	128
Jáné E.	120
Janigová I.	149, 159
Janíková L.	66
Jankovič Ľ.	159
Jarešová D.	157
Jílek P.	157
Jindřichová B.	100
Jirák D.	160
Jirátová M.	92, 160
John J.	99
Jokrllová J.	168
Jurášek M.	150
Jurčíková J.	171
Jureček Ľ.	162
Jurišová J.	74, 127

K

Kabutey A.	169, 170
Kačer P.	110
Káchová P.	83
Kalenda P.	128
Kalendová A.	126, 132
Kalina J.	101
Kaliňák M.	69
Kaman O.	66
Kameník J.	65
Kandriková B.	150
Kaprálková L.	84
Karas F.	107
Karel P.	157
Kasák P.	141
Kaszonyi A.	173, 174
Kejnovská I.	64
Kelnar I.	84
Kinart Z.	70, 113
Klikar M.	151
Kloda M.	128
Kluková Ľ.	59

Kmoníčková E.	150
Kočanová V.	103, 169, 170
Kodým R.	106, 107
Koktan J.	66, 119
Kolář M.	76
Kolařík J.	77, 78
Kolářová L.	113
Kollár J.	91, 148
Kolská Z.	137
Kolská Z.ň.	165
Koman M.	78
Koóš M.	93
Koóš P.	154
Kopecká P.	167, 168
Kore N.	88
Kos J.	144, 152
Kotek J.	125, 129, 133
Koudelka L.	128, 139
Kout M.	129
Kozák J.	162
Král V.	167
Králová R.	75
Krasnovský B.	98
Krátká H.	111
Krátký M.	152, 163
Krchová T.	129
Křen V.	73
Křenková K.	70
Kreps F.	100, 101, 102, 105
Kříž M.	94
Křížek M.	75
Kronek J.	92
Kroneková Z.	91
Krupka J.	141
Kryštof V.	153
Ktena E.	111
Kubát P.	127
Kučera L.	113
Kučka J.	82, 153, 158
Kufa M.	163
Kuliček J.	84
Kuličková	66
Kupcová E.	114
Kvítek L.	75, 76

L

Lacík I.	91
Langášek P.	169, 170
Laryšová A.	114
Lásiková A.	88
Lehn J. M.	59
Leitner J.	165

Lhotka M.	169
Lin Ch. H.	93
Liptaj T.	142
Lochmanová A.	70
Lokaj J.	130
Lopatka P.	154
Lorenc D.	116, 120
Lubal P.	117, 139
Lukávsky J.	145
Lukešová M.	168

M

Mach K.	146
Macháčková Z.	80
Machala L.	75
Machalický O.	102
Machata M.	79
Machovič V.	146, 169
Macko J.	72
Macová E.	148
Mácová P.	138
Magdolen P.	116
Majdl M.	150
Malatinský T.	154
Malinová L.	83
Mališ J.	109
Malkina O. L.	112
Marchalín Š.	123
Marek A.	155
Marková Z.	71
Markovič M.	154
Martinková J.	109
Martinková M.	89, 143, 158, 161, 162
Masárová P.	79
Mašek I.	98
Mastný L.	130
Matoušová K.	132
Mattová J.	153
Matulka D.	157
Matulková I.	80
Máziková J.	159
Mazúr M.	69
Mečiarová M.	159
Měřinská D.	75
Michal R.	131
Michalicová P.	115
Mičicová Z.	135
Mičušik M.	84, 172
Mikula M.	131
Milata V.	97, 98, 130
Mirsky V. M.	84
Mizera J.	65

Mlateček M.	81
Moncol J.	63, 78, 79, 130
Moravčíková D.	83, 91
Mosinger J.	127
Mošková Joches D.	156, 159
Mosnáček J.	83, 91
Mošner P.	128, 139
Motola M.	131
Mravec F.	115, 121
Mrlík M.	91
Mucha M.	77
Můčka V.	115
Muselík J.	167, 168
Muselíková J.	170

N

Navrátil T.	67, 116
Navrátilová Z.	105, 114
Nazabal V.	122
Nechvílová K.	126, 132
Neděla O.	137
Nemec I.	79
Němec I.	80, 128
Němec P.	80, 122, 128
Němeček M.	106
Neumann D.	167, 168
Neužilová B.	115
Nevin E.	152
Nógellová Y.	156
Nosáľová G.	162
Noskovičová E.	116, 120
Nováková K.	116
Novotná Z.	133
Novotný L.	169, 170
Nýblová D.	132

O

Omastová M.	84, 156, 157, 172
Ondriaš J.	150
Ondrušová D.	135
Oravec M.	144
Oriňák A.	72, 73
Oriňáková R.	72, 73

P

Paidar M.	107, 108, 109, 173
Pajtášová M.	135
Palarčík J.	102, 103, 104, 170
Pálka K.	125

Panáček A. 75, 76, 104
 Pařík P. 96
 Pařízek M. 163
 Parkan K. 143, 158
 Pauk K. 166
 Paúrová M. 133
 Pavlíček V. 117
 Pavlíčková V. 150
 Pavlík J. 163
 Pavloková S. 167, 168
 Pazdera P. 88, 146, 160
 Pechoušek J. 75
 Pedersen M. H. F. 155
 Pekař M. 115, 121
 Pelikánová B. 117
 Peña-Méndez E. M. 113, 134
 Pérez-Estébanez M. 138
 Pernica M. 117
 Pešková L. 170
 Petr J. 171
 Petránková R. 169, 170
 Pidluzhna A. 157
 Pihíková P. 59
 Pivoňková H. 64
 Plesch G. 131
 Plocek J. 81
 Podhradská S. 157
 Pogányová D. 150
 Polák J. 112
 Policianová O. 163
 Polívková M. 133, 136
 Polonský J. 106
 Pomikalová K. 89
 Porsch B. 73
 Portychová L. 101
 Pospíšil J. 60
 Pospíšilová A. 82, 92
 Poučková P. 153
 Přádný M. 163
 Prášilová J. 96
 Pravda J. 100
 Příbyl P. 145
 Princ I. 98
 Procházka M. 118, 120
 Procházka V. 171
 Procházková S. 118
 Prokeš J. 140
 Prokeš L. 122, 134
 Prokop M. 108
 Pucek R. 71, 75, 76, 77, 78
 Psotka M. 158
 Pultar M. 173
 Putala M. 85

Pyszková M. 73

R

Radoňák J. 72
 Ranc V. 71, 75, 110
 Řanda Z. 65
 Raník L. 135
 Rathí A. K. 75
 Reguli J. 96
 Reiffová K. 114
 Remeš M. 149
 Řepková K. 158
 Řezanka M. 66, 119
 Řezanka P. 66, 119
 Řezanková K. 66, 119
 Řezníčková A. 135, 136
 Rimpelová S. 137, 150
 Roch T. 131
 Rolíncová V. 144
 Roubalík M. 173
 Ruml T. 150
 Růžicková Z. 81
 Rybáková S. 139
 Rybínová M. 119
 Rychlá L. 149
 Rychlovský P. 119
 Rychlý J. 149

S

Sabadková D. 167, 168
 Sabol M. 98
 Šafař P. 123
 Šafařík Z. 98
 Sajdl P. 137
 Šalitraš I. 79
 Samcová E. 112, 117
 Satrapinskyy L. 131
 Scherbahn V. 84
 Schmidt Š. 100, 101, 102, 105
 Šebesta R. 159
 Šebestová A. 171
 Sedláček O. 82, 92, 153, 158, 160
 Sedláčková H. 66, 119
 Sedlák M. 89, 140
 Sedlářová I. 173
 Sedničková M. 156, 159
 Sekretár S. 100, 101, 102, 105
 Šelešovská R. 66, 67
 Šeršeň F. 168
 Ševčík R. 138

Sghaier A. B.	156
Sharma V. K.	77, 78
Šidlo M.	117
Siegel J.	133, 135, 136
Sigmundová I.	116
Šimbera J.	160
Šimek	109
Šimůnek P.	85
Širová M.	90
Šišková A.	148, 172
Sivová V.	162
Sivý J.	123
Škantárová L.	73
Sklenářová H.	121
Sleha R.	170
Slehová E.	102, 103, 104
Slepička P.	137
Slepičková Kasálková N.	137
Slezák M.	103, 104
Šlouf M.	163
Slušná L.	120
Šmejkalová P.	83
Smékalová M.	76
Šmogrovičová D.	61
Smoláková L.	129
Šnita D.	106, 107
Sokol J.	67
Solich P.	121
Sorádová Z.	159
Šoral M.	142
Šoška P.	74
Sotáková I.	95
Spišáková M.	154
Špitalský Z.	91
Šrámková P.	92
Štadániová R.	144
Staszek M.	136
Stejskal J.	140
Štěpánek P.	73, 123
Štěpánková M.	66
Štěpánková Š.	122
Štěpánová V.	134
Stolaříková J.	163
Štolcová M.	173, 174
Straková R.	112
Stráník J.	144
Studenovský M.	90
Šurab P.	150
Šútorová K.	122
Švajdlenková H.	168
Švajleninová Z.	89
Švec P.	82, 160
Švecová Š.	161

Švikruhá S.	65
Svítková J.	65
Švorc E.	60, 65
Švorčík V.	133, 135, 136, 137, 165
Sýkorová I.	146
Synytsya A.	100
Syslová K.	110
Szczepaniak L.	123
Szewieczková J.	121
Szocs V.	120

T

Takácsová M.	161
Taraba L.	81
Tesaříková Svobodová A.	75
Tkac J.	59
Tmáková L.	100
Todorov R.	126
Tomanová P.	150
Tomášková M.	67
Tošner Z.	125
Trávníček Z.	79
Trchová M.	140
Trnková L.	64
Trousil J.	73, 123
Trousil V.	102, 104
Tuček J.	77, 78
Tůma P.	112, 117
Turjan J.	162
Türkeová I.	121
Tvaroška I.	93
Tvrdoňová M.	162

U

Uher M.	97, 98
Uhrecký R.	78
Ulrichová J.	73

V

Vacek J.	73
Vajíček S.	174
Valentová O.	100
Valko M.	69
Vaněrková D.	101
Vaňhara P.	113
Vargová J.	72
Varma R. S.	75, 77
Večeřová R.	76
Vejsová M.	157

Velič D.	72, 116, 118, 120
Veselovská L.	150
Veselý I.	163
Veselý J.	149, 163
Vetrík M.	82, 163
Vičar D.	98
Vídenský J.	173
Vidláková P.	64
Vik O.	138
Vinšová J.	152, 163
Vít J.	172, 174
Vítková K.	171
Vladimír B.	157
Vlček M.	125, 126
Vondroušová	110
Vorčáková K.	122
Vorlíčková M.	64
Vorokhta M.	139
Votroubková M.	164
Vrábel V.	123
Vrbková E.	164
Vrbovský V.	114
Vyskočil V.	64

Vyskočilová E.	164
Vývleková Z.	144

W

Wallace E.	169
Weidlich T.	109
Weinštuk M.	139

Z

Záborský O.	144, 164
Zadinová M.	153
Záhradník P.	116
Žáková P.	165
Zapletal M.	164
Zatloukalová M.	73
Zbořil R.	71, 75, 76, 77, 78, 104
Zelinka K.	160
Zimmermann T.	165
Žitka J.	108

PROGRAM PREDNÁŠOK

Sekcia 1: Analytická a fyzikálna chémia

Miestnosť: podľa plánu miestností na obálke (žltý farebný kód)

Utorok

08.09.2015

09:30-09:45 Slávnostné otvorenie Zjazdu, Sála Grand Bellevue

09:45-10:45 **Plenárna prednáška: Jean-Marie Lehn**

PERSPECTIVES IN CHEMISTRY: FROM SUPRAMOLECULAR CHEMISTRY TOWARDS ADAPTIVE CHEMISTRY

10:45-12:00 Prihovory hostí zjazdu, Sála Grand Bellevue

12:00-14:00 Obed, Hotel Bellevue

14:20-15:10 **PP1: Ján Tkáč**

APLIKÁCIA NANOMATERIÁLOV A IMOBILIZÁCIE KONTROLOVANEJ V NANOŠKÁLE PRI PRÍPRAVE ULTRACITLIVÝCH BIOSENZOROV A BIOPALIVOVÝCH ČLÁNKOV

14:20-15:10 **PP2: Jiří Pospíšil**

VÝVOJ NOVÝCH SYNTETICKÝCH POSTUPŮ A JEJICH APLIKACE PŘI SYNTÉZE PŘÍRODNÍCH LÁTEK

15:10-15:15 Presun z miestností pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií

15:15-15:25 Úvodné slová garantov k sekcii

15:25-18:00 Predseda sekcie: Renáta Selešovská

15:25-15:50 1P01

Miroslav Fojta, Pavlína Vidláková, Hana Pivoňková, Iva Kejnovská, Libuše Trnková, Michaela Vorlíčková, Luděk Havran
CHOVÁNÍ DNA OLIGONUKLEOTIDŮ TVOŘÍCÍCH G-KVADRUPLY NA ELEKTRICKY NABÍTÝCH POVRŠÍCH RTUŤOVÝCH A UHLÍKOVÝCH ELEKTROD

15:50-16:15 1P02

Vlastimil Vyskočil
NEW APPROACHES IN THE DEVELOPMENT OF NOVEL ELECTROCHEMICAL (BIO)SENSORS

16:15-16:45 Občerstvenie, Hotel Bellevue

16:45-17:10 1P03

Jana Svítková, Silvia Švikruhová, Ľubomír Švorc
VÝVOJ A APLIKÁCIA DNA BIOSENZORA ZALOŽENÉHO NA VYUŽITÍ BÓROM DOPOVANEJ DIAMANTOVEJ ELEKTRÓDY V OBLASTI FARMACEUTICKEJ ANALÝZY

17:10-17:35 1P04

Jiří Mizera, Zdeněk Řanda, Jan Kameník
GEOCHEMICAL CHARACTERIZATION OF AUSTRALASIAN TEKTITES IN SEARCH OF THEIR SOURCE MATERIALS AND PARENT CRATER

17:35-18:00 1P05

Jakub Koktan, Ondřej Kaman, Klára Řezanková, Helena Sedláčková, Michal Řezanka, Jarmila Kuličková, Pavel Řezanka
HYBRIDNÍ MAGNETICKÉ NANOČÁSTICE PRO KOMPLEXACE
AROMATICKÝCH LÁTEK

18:00-20:00 Večera, Hotel Bellevue

19:00-21:00 Valné zhromaždenie SCHS , Hotel Bellevue

20:00-23:00 Postery a vínný večer , Hotel Bellevue

Streda

09.09.2015

09:00-09:50 **PP3: Ľubomír Švorc**

VYUŽITIE NETRADIČNÝCH ELEKTRODOVÝCH MATERIÁLOV VO
FARMACEUTICKEJ A KLINICKEJ ANALÝZE

09:00-09:50 **PP4: Daniela Šmogrovičová**

PIVO A ZDRAVIE-OD MÝTOV K VEDE

09:50-09:55 Presun z miestností pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií

09:55-12:00 Predseda sekcie: Ľubomír Švorc

09:55-10:20 1P06

Renáta Šelešovská, Lenka Janíková, Michaela Štěpánková, Jaromíra Chýlková
MĚŘENÁ AMALGÁMOVÁ ELEKTRODA JAKO CITLIVÝ
VOLTAMETRICKÝ SENZOR PRO STANOVENÍ
CHEMOTERAPEUTICKÉHO LÉČIVA 5-FLUOROURACILU

10:20-10:45 1P07

Markéta Tomášková, Jaromíra Chýlková, Tomáš Navrátil, Renáta Šelešovská
VOLTAMETRICKÉ STANOVENÍ VYBRANÝCH ANTIOXIDANTŮ V
ROPNÝCH PRODUKTECH

10:45-11:10 Občerstvenie, Hotel Bellevue

11:10-11:35 1P08

Jozef Sokol, Zuzana Dičáková
STANOVENIE BIOGENNÝCH AMÍNŮV V POTRAVINÁCH

11:35-12:00 1P09

Milan Mazúr, Katarína Furdíková, Michal Kaliňák, Marián Valko
MONITORING OF GRAPE WINE PRODUCTION BY NMR
SPECTROSCOPY

12:00-13:30 Obed, Hotel Bellevue

13:30-18:00 Výlety

18:00-20:00 Večera, Hotel Bellevue

20:00-23:00 Postery a pivný večer , Hotel Bellevue

Štvrtok

10.09.2015

09:00-09:50 **PP5: Jozef Čársky**

200 ROKOV OD SMRTI A. RUPRECHTA

09:00-09:50 **PP6: Ján Imrich**

NOVÉ PROFLAVÍNY A SPIROCYKLY AKRIDÍNU AKO SĽUBNÉ DNA-
INTERKALÁTORY A ANTITUMOROVÉ LÁTKY

09:50-09:55 Presun z miestností pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií

09:55-12:00 Predseda sekcie: Nováková

09:55-10:20 1P10

Karolína Křenková, Michal Haluzík, Alexandra Lochmanová, Marek Bužga
IZOLACE MONONUKLEÁRNÍCH BUNĚK Z PERIFERNÍ KRVE A
JEJICH DETEKCE PRŮTOKOVOU CYTOMETRIÍ U PACIENTŮ PO
BARIATRICKÝCH OPERACÍCH

10:20-10:45 1P11

Zdzisław Kinart, Adam Bald
VISCOSITY COEFFICIENTS B of KCl, NaCl, NaI, NaBr, KNO₃, LiNO₃,
AgNO₃, NaClO₄, NaBPh₄, Bu₄NI AND Et₄NI IN RICH OF WATER BINARY
MIXTURES CONTAINING PROPAN-1-OL AT 298.15 K

10:45-11:10 Občerstvenie, Hotel Bellevue

11:10-11:35 1P12

Zuzana Chaloupková, Zdeňka Marková, Václav Ranc, Radek Zbořil
STANOVENÍ PROSTATICKEHO SPECIFICKÉHO MEMBRÁNOVÉHO
ANTIGENU (PSMA) POMOCÍ KOMBINACE NANOKOMPOZITU
Fe₃O₄@AG A MAGNETICKY ASISTOVANÉ POVRCHOVĚ ZESÍLENÉ
RAMANOVY SPEKTROSKOPIE

11:35-12:00 1P13

Ariana Fargašová, Robert Pucek, Václav Ranc, Klára Černá
DETEKCE BAKTERIÍ V KLOUBNÍCH PUNKTÁTECH METODOU
POVRCHEM ZESÍLENÉ RAMANOVY SPEKTROSKOPIE

12:00-12:25 1P14

Branislav Erdelyi, Renáta Oriňáková, Andrej Oriňák, Dušan Velič, Vladimír
Girman
M/CNTS KATALYZÁTORY PRE OPTIMALIZÁCIU PYROLÝZNEJ
KONVERZIE METÁNU NA VODÍK

12:30-14:00 Obed, Hotel Bellevue

14:20-15:10 **PP7: Ján Moncol'**

100 ROKOV CHEMICKEJ KRYŠTALOGRAFIE A PERSPEKTÍVY

14:20-15:10 **PP8: Elena Hájeková**

RECYKLÁCIA POLYMÉRNÝCH ODPADOV

15:10-15:15 Presun z miestností pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií

15:15-17:45 Predseda sekcie: Vlastimil Vyskočil

15:15-15:40 1P15

Ján Macko, Renáta Oriňáková, Andrej Oriňák, Jana Vargová, Denisa
Harvanová, Jozef Radoňák
INHIBÍCIA PROLIFERÁCIE BUNIEK NA NANOOBJEKTOVOM
HYBRIDNOM SUBSTRÁTE

15:40-16:05 1P16

Jiří Trousil, Sergey Filippov, Martin Hrubý, Bedřich Porsch, Petr Štěpánek
NANOFORMULACE RIFAMPICINU V LÉČBĚ MULTIREZISTENTNÍ
TUBERKULÓZY: PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE

16:05-16:30 Občerstvenie, Hotel Bellevue

16:30-16:55 1P17

Martina Zatloukalová, Michaela Pyszková, Vladimír Křen, Jitka Ulrichová, Jan
Vacek
OXIDACE FLAVONOLIGNANŮ A JEJICH INTERAKCE S DNA A
PROTEINY

16:55-17:20 1P18

Lenka Škantárová, Renáta Oriňaková, Andrej Oriňak
ELEKTROCHEMICKÁ MODIFIKÁCIA TLAČENÝCH UHLÍKOVÝCH
ELEKTROD FUNKČNÝMI KOVOVÝMI NANOČASTICAMI

17:20-17:45

19:00-23:59 Slávnostný večierok s vyhodnotením posterovej súťaže, Hotel Bellevue

Piatok

11.09.2015

09:00-10:15

09:00-09:25

09:25-09:50

09:50-10:15

10:15-10:45 Občerstvenie, Hotel Bellevue

10:45-12:00 Panelová diskusia ako záver zjazdu

12:00-14:00 Obed, Hotel Bellevue

Sekcia 2: Anorganická a materiálová chémia

Miestnosť: podľa plánu miestností na obálke (modrý farebný kód)

Utorok

08.09.2015

09:30-09:45 Slávnostné otvorenie Zjazdu, Sála Grand Bellevue

09:45-10:45 **Plenárna prednáška: Jean-Marie Lehn**
PERSPECTIVES IN CHEMISTRY: FROM SUPRAMOLECULAR
CHEMISTRY TOWARDS ADAPTIVE CHEMISTRY

10:45-12:00 Príhovory hostí zjazdu, Sála Grand Bellevue

12:00-14:00 Obed, Hotel Bellevue

14:20-15:10 **PP1: Ján Tkáč**
 APLIKÁCIA NANOMATERIÁLOV A IMOBILIZÁCIE
 KONTROLOVANEJ V NANOŠKÁLE PRI PRÍPRAVE
 ULTRACITLIVÝCH BIOSENZOROV A BIOPALIVOVÝCH ČLÁNKOV

14:20-15:10 **PP2: Jiří Pospíšil**
 VÝVOJ NOVÝCH SYNTETICKÝCH POSTUPŮ A JEJICH APLIKACE
 PŘI SYNTÉZE PŘÍRODNÍCH LÁTEK

15:10-15:15 Presun z miestností pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií

15:15-15:25 Úvodné slová garantov k sekcii

15:25-18:00 Predseda sekcie: L. Kvítek, V. Danielik

15:25-15:50 2P01

Vladimír Danielik, Peter Šoška, Jana Jurišová
 KORÓZNE VLASTNOSTI HEXAHYDRÁTU DUSIČNANU
 HOREČNATÉHO

15:50-16:15 2P02

Radka Králová, Anuj K. Rath, Manoj B. Gawande, K.K.R. Datta, Václav
 Ranc, Rajender S. Varma, Libor Kvítek, Radek Zbořil
 VYUŽITÍ KOMPOZITU NA BÁZI REDUKOVANÉHO GRAFEN OXIDU
 A ZLATÝCH NANOČÁSTIC PRO SUZUKI REAKCE A OXIDATIVNÍ
 ESTERIFIKACE

16:15-16:45 Občerstvenie, Hotel Bellevue

16:45-17:10 2P03

Libor Kvítek, Aleš Panáček, Robert Pucek, Libor Machala, Michal Křížek,
 Jiří Pechoušek, Alice Tesaříková Svobodová, Dagmar Měřínská
 APLIKACE NANOČÁSTIC V AKTIVNÍCH OBALOVÝCH FOLIÍCH

17:10-17:35 2P04

Aleš Panáček, Monika Smékalová, Renata Večeřová, Milan Kolář, Robert
 Pucek, Libor Kvítek, Radek Zbořil
 ZVÝŠENÍ ANTIBAKTERIÁLNÍ AKTIVITY ANTIBIOTIK KOMBINACÍ
 S NANOČÁSTICEMI STŘÍBRA VŮČI MULTIREZISTENTNÍM
 BAKTERIÍM

17:35-18:00 2P05

Martin Mucha
 VLIV UHLIČITANŮ OBSAŽENÝCH V SORPČNÍCH MATERIÁLECH
 PŘI SORPCI TĚŽKÝCH KOVŮ

18:00-20:00 Večera, Hotel Bellevue

19:00-21:00 Valné zhromaždenie SCHS, Hotel Bellevue

20:00-23:00 Postery a vínny večer, Hotel Bellevue

Streda

09.09.2015

- 09:00-09:50 **PP3: Ľubomír Švorc**
VYUŽITIE NETRADIČNÝCH ELEKTRODOVÝCH MATERIÁLOV VO FARMACEUTICKEJ A KLINICKEJ ANALÝZE
- 09:00-09:50 **PP4: Daniela Šmogrovičová**
PIVO A ZDRAVIE-OD MÝTOV K VEDE
- 09:50-09:55 Presun z miestností pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií
- 09:55-12:00
- 09:55-10:20
- 10:20-10:45
- 10:45-11:10 Občerstvenie, Hotel Bellevue
- 11:10-11:35
- 11:35-12:00
- 12:00-13:30 Obed, Hotel Bellevue
- 13:30-18:00 Výlety
- 18:00-20:00 Večera, Hotel Bellevue
- 20:00-23:00 Postery a pívny večer , Hotel Bellevue

Štvrtok

10.09.2015

- 09:00-09:50 **PP5: Jozef Čársky**
201 ROKOV OD SMRTI A. RUPRECHTA
- 09:00-09:50 **PP6: Ján Imrich**
NOVÉ PROFLAVÍNY A SPIROCYKLY AKRIDÍNU AKO SĽUBNÉ DNA-INTERKALÁTORY A ANTITUMOROVÉ LÁTKY
- 09:50-09:55 Presun z miestností pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií
- 09:55-12:00 Predseda sekcie: M. Koman, I. Němec
- 09:55-10:20 2P06
Robert Prucek, Jan Kolařík, Jiří Tuček, Rajender S. Varma, Virender K. Sharma, Radek Zbořil
ODSTRANĚNÍ ARSENU Z VODNÉHO PROSTŘEDÍ POMOCÍ ŽELAZANŮ
- 10:20-10:45 2P07
Jan Kolařík, Robert Prucek, Jiří Tuček, Ivana Hušková, Jan Filip, Virender K. Sharma, Radek Zbořil
ODSTRANĚNÍ KOVŮ Z VODNÉHO PROSTŘEDÍ POMOCÍ FERÁTU(VI): STUDIUM KINETIKY A MECHANISMU
- 10:45-11:10 Občerstvenie, Hotel Bellevue
- 11:10-11:35 2P08
M. Koman, R. Uhrecký, J. Moncol, J. Derco
STRUCTURAL STUDY AND CATALYTIC ACTIVITY OF NEW MN(III) AND FE(III) DIPICOLINATE COMPLEXES
- 11:35-12:00 2P09
Petra Masárová, Ivan Šalitroš, Milan Gembický, Ján Moncol, Ivan Nemec
SYNTHESIS, STRUCTURAL AND MAGNETOCHEMICAL STUDY OF THE IRON(III) SCHIFF BASE COMPOUNDS
- 12:00-12:25 2P10
Marek Machata, Ivan Nemec, Radovan Herchel, Zdeněk Trávníček
ŠTVORJADROVÉ KOMPLEXY NI(II) S MOTÍVOM KUBÁNOVÉHO A NEÚPLNÉHO DIKUBÁNOVÉHO JADRA
- 12:30-14:00 Obed, Hotel Bellevue

- 14:20-15:10 **PP7: Ján Moncol'**
101 ROKOV CHEMICKEJ KRYŠTALOGRAFIE A PERSPEKTÍVY
- 14:20-15:10 **PP8: Elena Hájeková**
RECYKLÁCIA POLYMÉRNÝCH ODPADOV
- 15:10-15:15 Presun z miestností pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií
- 15:15-17:45 Predseda sekcie: J. Moncol'
-
- 15:15-15:40 2P11
Ivan Němec, Zorka Macháčková, Irena Matulková, Ivana Císařová, Petr Němec
SOLI A KOMPLEXY GUANIDINIA-STÁLE ATRAKTIVNÍ MATERIÁLY PRO NELINEÁRNÍ OPTIKU
- 15:40-16:05 2P12
David Havlíček, Jiří Plocek, Lukáš Taraba
ÚLOHA VODÍKOVÉ VAZBY PŘI PROTONOVÉ VODIVOSTI KRYSTALICKÝCH LÁTEK; MĚŘENÍ NA PRÁŠKOVÝCH VZORCÍCH
- 16:05-16:30 Občerstvenie, Hotel Bellevue
- 16:30-16:55 2P13
Martin Mlateček, Jan Honzíček, Libor Dostál, Zdeňka Růžičková, Milan Erben
KOORDINAČNÍ VLASTNOSTI FENYL-TRIS(1,2,4-DIAZAFOSFOLYL)BORÁTOVÉHO LIGANDU
- 16:55-17:20
- 17:20-17:45
- 19:00-23:59 Slávnostný večierok s vyhodnotením posterovej súťaže, Hotel Bellevue
- Piatok**
- 11.09.2015**
- 09:00-10:15
- 09:00-09:25
- 09:25-09:50
- 09:50-10:15
- 10:15-10:45 Občerstvenie, Hotel Bellevue
- 10:45-12:00 Panelová diskusia ako záver zjazdu
- 12:00-14:00 Obed, Hotel Bellevue

Sekcia 3: Organická chémia a polyméry

Miestnosť: podľa plánu miestností na obálke (červený farebný kód)

Utorok**08.09.2015**

09:30-09:45 Slávnostné otvorenie Zjazdu, Sála Grand Bellevue

09:45-10:45 Plenárna prednáška: Jean-Marie Lehn
PERSPECTIVES IN CHEMISTRY: FROM SUPRAMOLECULAR
CHEMISTRY TOWARDS ADAPTIVE CHEMISTRY

10:45-12:00 Prihovory hostí zjazdu, Sála Grand Bellevue

12:00-14:00 Obed, Hotel Bellevue

14:20-15:10 **PP1: Ján Tkáč**
APLIKÁCIA NANOMATERIÁLOV A IMOBILIZÁCIE
KONTROLOVANEJ V NANOŠKÁLE PRI PRÍPRAVE
ULTRACITLIVÝCH BIOSENZOROV A BIOPALIVOVÝCH ČLÁNKOV14:20-15:10 **PP2: Jiří Pospíšil**
VÝVOJ NOVÝCH SYNTETICKÝCH POSTUPŮ A JEJICH APLIKACE
PŘI SYNTÉZE PŘÍRODNÍCH LÁTEK

15:10-15:15 Presun z miestností pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií

15:15-15:25 Úvodné slová garantov k sekcii

15:25-18:00 Predseda sekcie: Zdenko Špitalský

15:25-15:50 3P01

Martin Hrubý, Jan Kučka, Ondřej Sedláček, Miroslav Vetrík, Aneta
Pospíšilová, Pavel ŠvecPOLYMERY A RADIONUKLIDY-CO TATO KOMBINACE MŮŽE
PŘINĚST PRO RADIOFARMACEUTICKÉ APLIKACE?

15:50-16:15 3P02

Katarína Borská, Daniela Moravčíková, Anita Eckstein-Andicsová, Jaroslav
MosnáčekSTUDY OF PHOTOCHEMICALLY INDUCED ATOM TRANSFER
RADICAL POLYMERIZATION OF (METH)ACRYLATES IN THE
PRESENCE OF OXYGEN

16:15-16:45 Občerstvenie, Hotel Bellevue

16:45-17:10 3P03

Lenka Malinová, Jiří Brožek, Pavla Káchová, Pavla Šmejkalová
ANAEROBNÍ DEGRADACE POLYESTERAMIDOVÝCH
VLÁKENNÝCH VRSTEV

17:10-17:35 3P04

Jaroslav Kuliček, Matej Mičušík, Vitali Scherbahn, Vladimír M. Mirsky,
Mária OmastováELECTRODES DECORATED BY METAL NANOPARTICLES FOR
SENSING APPLICATION

17:35-18:00 3P05

Ivan Kelnar, Ludmila Kaprálková
MIKROFIBRILÁRNÍ KOMPOZITY: MOŽNOSTI JEJICH ZLEPŠENÍ
APLIKACÍ NANOPLNIV

18:00-20:00 Večera, Hotel Bellevue

19:00-21:00 Valné zhromaždenie SCHS , Hotel Bellevue

20:00-23:00 Postery a vínny večer , Hotel Bellevue

Streda

09.09.2015

- 09:00-09:50 **PP3: Ľubomír Švorc**
VYUŽITIE NETRADIČNÝCH ELEKTRODOVÝCH MATERIÁLOV VO FARMACEUTICKEJ A KLINICKEJ ANALÝZE
- 09:00-09:50 **PP4: Daniela Šmogrovičová**
PIVO A ZDRAVIE-OD MÝTOV K VEDE
- 09:50-09:55 Presun z miestností pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií
- 09:55-12:00 Predseda sekcie: Filip Bureš
- 09:55-10:20 3P06
Martin Putala
OLIGOTIOFÉNOVÉ DERIVÁTY PRE APLIKÁCIE V ORGANICKEJ ELEKTRONIKE
- 10:20-10:45 3P07
Břetislav Brož, Petr Šimůnek
VYUŽITÍ INTRAMOLEKULÁRNÍ N-ARYLACE PRO SYNTÉZU TRICYKLICKÝCH SLOUČENIN OBSAHUJÍCÍCH 1,4-DIHYDROCHINOLINOVÝ SKELET
- 10:45-11:10 Občerstvenie, Hotel Bellevue
- 11:10-11:35 3P08
Jiří Hanusek, Jana Baťová
TRANSFORMACE EZETIMIBU V BAZICKÉM PROSTŘEDÍ
- 11:35-12:00 3P09
Mariana Budovská
SPIROCYKLIZAČNÉ REAKCIE INDOLOVÉHO FYTOALEXÍNU BRASINÍNU A JEHO DERIVÁTOV
- 12:00-13:30 Obed, Hotel Bellevue
- 13:30-18:00 Výlety
- 18:00-20:00 Večera, Hotel Bellevue
- 20:00-23:00 Postery a pívny večer , Hotel Bellevue

Štvrtok

10.09.2015

- 09:00-09:50 **PP5: Jozef Čársky**
202 ROKOV OD SMRTI A. RUPRECHTA
- 09:00-09:50 **PP6: Ján Imrich**
NOVÉ PROFLAVÍNY A SPIROCYKLY AKRIDÍNU AKO SĽUBNÉ DNA-INTERKALÁTORY A ANTITUMOROVÉ LÁTKY
- 09:50-09:55 Presun z miestností pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií
- 09:55-12:00 Predseda sekcie: Martin Putala
- 09:55-10:20 3P10
Filip Bureš
PUSH-PULL DERIVÁTY PYRAZINU JAKO EFEKTIVNÍ FOTOREDOX KATALYZÁTORY
- 10:20-10:45 3P11
Angelika Lásiková, Jana Doháňošová, Tibor Gracza
STEREOSELEKTIVITA Pd-CYKLIZÁCIÍ V DOMINO REAKCIÁCH
- 10:45-11:10 Občerstvenie, Hotel Bellevue
- 11:10-11:35 3P12
Pavel Pazdera, Nitin Kore, Dana Herová
KATALÝZA MĚDNÝMI KOMPLEXY V POST-ULLMANNOVĚ DOBĚ
- 11:35-12:00 3P13

- Kvetoslava Pomikalová, Miroslava Martinková, Zuzana Švajleninová, Jozef Gonda
STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA 1-DEOXYSFINGOIDNÝCH BÁZ
12:00-12:25 3P14
Miloš Sedlák, Jiří Hanusek, Pavel Drabina
IMOBILIZOVANÉ MĚDNATÉ KOMPLEXY-RECYKLOVATELNÉ
ENANTIOSELEKTIVNÍ KATALYZÁTORY PRO HENRYHO REAKCI
12:30-14:00 Obed, Hotel Bellevue
14:20-15:10 **PP7: Ján Moncol'**
102 ROKOV CHEMICKEJ KRYŠTALOGRAFIE A PERSPEKTÍVY
14:20-15:10 **PP8: Elena Hájeková**
RECYKLÁCIA POLYMÉRNÝCH ODPADOV
15:10-15:15 Presun z miestností pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií
15:15-17:45 Predseda sekcie: Martin Hrubý
- 15:15-15:40 3P15
Martin Studenovský, Milada Šírová
VYUŽITÍ POLYMERNÍCH DONORŮ OXIDU DUSNATÉHO PRO
ZVÝŠENÍ AKUMULACE CYTOSTATIK A IMUNOMODULÁTORŮ V
MIKROPROSTŘEDÍ PEVNÝCH NÁDORŮ
15:40-16:05 3P16
Zdeno Špitalský
GRAFÉN-POLYMÉRNE NANOKOMPOZITY NA POVRCHOVÚ
ÚPRAVU TEXTÍLIÍ
16:05-16:30 Občerstvenie, Hotel Bellevue
16:30-16:55 3P17
Daniela Moravčíková, Jozef Kollár, Miroslav Mrlík, Zuzana Kroneková,
Igor Lacík, Jaroslav Mosnáček
TULIPS AS A SOURCE OF MONOMER FOR SUPERABSORBENT
HYDROGELS
16:55-17:20 3P18
Aneta Pospíšilová, Ondřej Sedláček, Martin Hrubý, Markéta Jirátová
SYNTÉZA POLYMERNÍCH KONJUGÁTŮ LIGANDŮ
MUSKARINOVÉHO RECEPTORU PRO ONKOLOGICKOU
DIAGNOSTIKU A TERAPII
17:20-17:45 3P19
Petra Šrámková, Juraj Kronek
PRÍPRAVA HYPERVETVENÝCH POLY(ESTERAMIDOV) A
POLY(ÉTERAMIDOV) AKO MAKROINICIÁTOROV PRE
KATIÓNOVÚ POLYMERIZÁCIU 2-OXAZOLÍNŮV
19:00-23:59 Slávnostný večierok s vyhodnotením posterovej súťaže, Hotel Bellevue
- Piatok**
11.09.2015
09:00-10:15 Predseda sekcie: Martin Studenovský
09:00-09:25 3P20
Miroslav Horváth, Marek Cigáň, Martin Gáplovský, Klaudia Jakusová, Jana
Donovalová, Anton Gáplovský
MONOSTABLE PHOTOSWITCHES BASED ON HYDRAZONE-ANION
INTERACTION

- 09:25-09:50 3P21
Marek Baráth, Miroslav Kooš, Chun Hung Lin, Igor Tvaroška, Ján Hirsch
PRÍPRAVA POTENCIÁLNYCH INHIBÍTOROV
GLYKOZYLTRANSFERÁZ-SYNTÉZA MIMETÍK TS
- 09:50-10:15 3P22
Miroslav Kríž
OD ŠAMANOV K NARKOMANOM. ŠTRUKTÚRA, SYNTÉZA,
VLASTNOSTI A ÚČINKY PRÍRODNÝCH A SYNTETICKÝCH DROG
- 10:15-10:45 Občerstvenie, Hotel Bellevue
- 10:45-12:00 Panelová diskusia ako záver zjazdu
- 12:00-14:00 Obed, Hotel Bellevue

Sekcia 4: Vyučovanie a história chémie

Miestnosť: podľa plánu miestností na obálke (fialový farebný kód)

Utorok

08.09.2015

09:30-09:45 Slávnostné otvorenie Zjazdu, Sála Grand Bellevue

09:45-10:45 **Plenárna prednáška: Jean-Marie Lehn**

**PERSPECTIVES IN CHEMISTRY: FROM SUPRAMOLECULAR
CHEMISTRY TOWARDS ADAPTIVE CHEMISTRY**

10:45-12:00 Príhovory hostí zjazdu, Sála Grand Bellevue

12:00-14:00 Obed, Hotel Bellevue

14:20-15:10 **PP1: Ján Tkáč**

APLIKÁCIA NANOMATERIÁLOV A IMOBILIZÁCIE
KONTROLOVANEJ V NANOŠKÁLE PRI PRÍPRAVE
ULTRACITLIVÝCH BIOSENZOROV A BIOPALIVOVÝCH ČLÁNKOV

14:20-15:10 **PP2: Jiří Pospíšil**

VÝVOJ NOVÝCH SYNTETICKÝCH POSTUPŮ A JEJICH APLIKACE
PŘI SYNTÉZE PŘÍRODNÍCH LÁTEK

15:10-15:15 Presun z miestností pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií

15:15-15:25 Úvodné slová garantov k sekcií

15:25-18:00 Predseda sekcie: Ján Reguli

15:25-15:50 4P01

Hana Čtrnáctová

VÝUKA CHEMIE-SOUČASNOST A PERSPEKTIVA

15:50-16:15 4P02

Mária Ganajová, Ivana Sotáková

EFEKTÍVNOST BĚDATELSKY ORIENTOVANEJ VÝUČBY

16:15-16:45 Občerstvenie, Hotel Bellevue

16:45-17:10 4P03

Patrik Pařík

PŘÍNOS UP A IRER K PODPOŘE VZDĚLÁVÁNÍ A POZNÁVÁNÍ
ŽÁKŮ I VEŘEJNOSTI V OBLASTI CHEMIE

17:10-17:35 4P04

Jana Prášilová, Pavlína Ginterová

ZA CHEMIÍ DO PŘÍRODOVĚDNÉ LABORATOŘE PEVNOSTI
POZNÁNÍ

17:35-18:00 4P05

Ján Reguli

10 ROKOV SPOTREBITEĽSKEJ CHÉMIE V PRÍPRAVE UČITEĽOV
CHÉMIE

18:00-20:00 Večera, Hotel Bellevue

19:00-21:00 Valné zhromaždenie SCHS , Hotel Bellevue

20:00-23:00 Postery a vínný večer , Hotel Bellevue

Streda

09.09.2015

09:00-09:50 **PP3: Ľubomír Švorc**

VYUŽITIE NETRADIČNÝCH ELEKTRODOVÝCH MATERIÁLOV VO
FARMACEUTICKEJ A KLINICKEJ ANALÝZE

09:00-09:50 **PP4: Daniela Šmogrovičová**

PIVO A ZDRAVIE-OD MÝTOV K VEDE

09:50-09:55 Presun z miestností pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií

09:55-12:00	
09:55-10:20	
10:20-10:45	
10:45-11:10	Občerstvenie, Hotel Bellevue
11:10-11:35	
11:35-12:00	
12:00-13:30	Obed, Hotel Bellevue
13:30-18:00	Výlety
18:00-20:00	Večera, Hotel Bellevue
20:00-23:00	Postery a pívny večer , Hotel Bellevue
Štvrtok	
10.09.2015	
09:00-09:50	PP5: Jozef Čársky 203 ROKOV OD SMRTI A. RUPRECHTA
09:00-09:50	PP6: Ján Imrich NOVÉ PROFLAVÍNY A SPIROCYKLY AKRIDÍNU AKO SĽUBNÉ DNA-INTERKALÁTORY A ANTITUMOROVÉ LÁTKY
09:50-09:55	Presun z miestností pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií
09:55-12:00	Predseda sekcie: Jozef Čársky
09:55-10:20	4P06 <u>Michal Uher</u> , Ľudovít Hallon, Kamil Cejpek, Viktor Milata HISTÓRIA POTRAVINÁRSKEHO PRIEMYSLU NA SLOVENSKU
10:20-10:45	4P07 Branislav Krasnovský, Michal Uher, Miroslav Sabol, <u>Viktor Milata</u> HISTÓRIA SPRACOVANIA KOŽÍ A GARBIARSKY PRIEMYSEL NA SLOVENSKU
10:45-11:10	Občerstvenie, Hotel Bellevue
11:10-11:35	4P08 <u>Zdeněk Šafařík</u> , Dušan Vičar, Ivan Mašek, Ivan Princ VÝZNAMNÁ VÝROČÍ POUŽITÍ CHEMICKÝCH ZBRANÍ
11:35-12:00	4P09 <u>Jan John</u> COOPERATION IN EDUCATION AND TRAINING IN NUCLEAR- AND RADIOCHEMISTRY IN EUROPE
12:00-12:25	
12:30-14:00	Obed, Hotel Bellevue
14:20-15:10	PP7: Ján Moncol' 103 ROKOV CHEMICKEJ KRYŠTALOGRAFIE A PERSPEKTÍVY
14:20-15:10	PP8: Elena Hájeková RECYKLÁCIA POLYMÉRNÝCH ODPADOV
15:10-15:15	Presun z miestností pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií
15:15-17:45	
15:15-15:40	
15:40-16:05	
16:05-16:30	Občerstvenie, Hotel Bellevue
16:30-16:55	
16:55-17:20	
17:20-17:45	
19:00-23:59	Slávnostný večierok s vyhodnotením posterovej súťaže, Hotel Bellevue
Piatok	
11.09.2015	

09:00-10:15

09:00-09:25

09:25-09:50

09:50-10:15

10:15-10:45 Občerstvenie, Hotel Bellevue

10:45-12:00 Panelová diskusia ako záver zjazdu

12:00-14:00 Obed, Hotel Bellevue

Sekcia 5: Potravinárstvo, životné prostredie a biotechnológia

Miestnosť: podľa plánu miestností na obálke (oranžový farebný kód)

Utorok

08.09.2015

09:30-09:45 Slávnostné otvorenie Zjazdu, Sála Grand Bellevue

09:45-10:45 **Plenárna prednáška: Jean-Marie Lehn**

**PERSPECTIVES IN CHEMISTRY: FROM SUPRAMOLECULAR
CHEMISTRY TOWARDS ADAPTIVE CHEMISTRY**

10:45-12:00 Príhovory hostí zjazdu, Sála Grand Bellevue

12:00-14:00 Obed, Hotel Bellevue

14:20-15:10 **PP1: Ján Tkáč**

**APLIKÁCIA NANOMATERIÁLOV A IMOBILIZÁCIE
KONTROLOVANEJ V NANOŠKÁLE PRI PRÍPRAVE
ULTRACITLIVÝCH BIOSENZOROV A BIOPALIVOVÝCH ČLÁNKOV**

14:20-15:10 **PP2: Jiří Pospíšil**

**VÝVOJ NOVÝCH SYNTETICKÝCH POSTUPŮ A JEJICH APLIKACE
PŘI SYNTÉZE PŘÍRODNÍCH LÁTEK**

15:10-15:15 Presun z miestností pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií

15:15-15:25 Úvodné slová garantov k sekcii

15:25-18:00 Predseda sekcie: Štefan Schmidt

15:25-15:50 5P01

Stanislav Sekretár, Lenka Tmáková, Štefan Schmidt, František Kreps,
Zuzana Burčová

ŠPECIÁLNE PRODUKTY Z FYTOMASY

15:50-16:15 5P02

Roman Bleha, Jan Pravda, Barbora Jindřichová, Lenka Burketová, Andriy
Synytsya, Olga Valentová

**BIOACTIVE CARBOHYDRATES FROM FUNGI ALTERNARIA
BRASSICICOLA AND LEPTOSPHERA MACULANS, PATHOGENS
OF OILSEED RAPE (BRASSICA NAPUS)**

16:15-16:45 Občerstvenie, Hotel Bellevue

16:45-17:10 5P03

Barbora Hrvolová, Lenka Portychová, Dana Vaněrková, Jiří Kalina
STANOVENÍ ANTIOXIDAČNÍ AKTIVITY LUTEINU

17:10-17:35 5P04

Zuzana Burčová, František Kreps, Štefan Schmidt, Stanislav Sekretár
**OXIDÁCIA TOKOFEROLOV V OLEJOCH VYSTAVENÝCH
FRITOVACÍM TEPLOTÁM**

17:35-18:00 5P05

František Kreps, Zuzana Burčová, Štefan Schmidt, Stanislav Sekretár
**VPLYV VYSOKOTEPLOTNÉHO OHREVVU RASTLINNÝCH OLEJOV
NA DEGRADÁCIU TOKOFEROLOV**

18:00-20:00 Večera, Hotel Bellevue

19:00-21:00 Valné zhromaždenie SCHS , Hotel Bellevue

20:00-23:00 Postery a vínny večer , Hotel Bellevue

Streda

09.09.2015

- 09:00-09:50 **PP3: Ľubomír Švorc**
VYUŽITIE NETRADIČNÝCH ELEKTRODOVÝCH MATERIÁLOV VO
FARMACEUTICKEJ A KLINICKEJ ANALÝZE
- 09:00-09:50 **PP4: Daniela Šmogrovičová**
PIVO A ZDRAVIE-OD MÝTOV K VEDE
- 09:50-09:55 Presun z miestností pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií
- 09:55-12:00
- 09:55-10:20
- 10:20-10:45
- 10:45-11:10 Občerstvenie, Hotel Bellevue
- 11:10-11:35
- 11:35-12:00
- 12:00-13:30 Obed, Hotel Bellevue
- 13:30-18:00 Výlety
- 18:00-20:00 Večera, Hotel Bellevue
- 20:00-23:00 Postery a pívny večer , Hotel Bellevue

Štvrtok

10.09.2015

- 09:00-09:50 **PP5: Jozef Čársky**
204 ROKOV OD SMRTI A. RUPRECHTA
- 09:00-09:50 **PP6: Ján Imrich**
NOVÉ PROFLAVÍNY A SPIROCYKLY AKRIDÍNU AKO SĽUBNÉ
DNA-INTERKALÁTORY A ANTITUMOROVÉ LÁTKY
- 09:50-09:55 Presun z miestností pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií
- 09:55-12:00 Predseda sekcie: Stanislav Sekretár
- 09:55-10:20 5P06
Vojtěch Trousil, Zuzana Blažková, Eva Slehová, Jiří Palarčík, Oldřich
Machalický, Jiří Cakl
ODSTRANĚNÍ VYBRANÝCH NESTEROIDNÍCH ANTIREVMATIK
POMOCÍ HETEROGENNÍ FOTOKATALÝZY
- 10:20-10:45 5P07
Eva Slehová, Zuzana Blažková, Miloslav Slezák, Jiří Palarčík
VLIV VYBRANÝCH TĚŽKÝCH KOVŮ NA RŮST
ACIDITHIOBACILLUS FERROOXIDANS
- 10:45-11:10 Občerstvenie, Hotel Bellevue
- 11:10-11:35 5P08
Libor Dušek, Veronika Kočanová
ZVYŠOVÁNÍ EFEKTIVITY ODBOURÁVÁNÍ FOSFORU U DČOV
- 11:35-12:00 5P09
Zuzana Blažková, Eva Slehová, Vojtěch Trousil, Jiří Palarčík, Miloslav
Slezák, Jiří Cakl
AUTOTROFNÍ DENITRIFIKACE BAKTERIÍ THIOBACILLUS
DENITRIFICANS PODPOROVANÁ FOSFOREM A MOLYBDENEM
- 12:00-12:25 5P10
Šárka Hradilová, Aleš Panáček, Radek Zbořil
CYTOTOXICKÉ ÚČINKY NANOČÁSTIC STŘÍBRA A ZLATA NA
MYŠÍ FIBROBLASTY
- 12:30-14:00 Obed, Hotel Bellevue

- 14:20-15:10 **PP7: Ján Moncol'**
104 ROKOV CHEMICKEJ KRYŠTALOGRAFIE A PERSPEKTÍVY
- 14:20-15:10 **PP8: Elena Hájeková**
RECYKLÁCIA POLYMÉRNÝCH ODPADOV
- 15:10-15:15 Presun z miestností pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií
- 15:15-17:45 Predseda sekcie: Štefan Schmidt
- 15:15-15:40 5P11
Lenka Bláhová, Zuzana Navrátilová
ODSTRANĚNÍ CHROMU(VI) Z ROZTOKU POMOCÍ STRUSEK
- 15:40-16:05 5P12
Štefan Schmidt, Zuzana Burčová, Stanislav Sekretár, František Kreps, Milan Čertík
- 16:05-16:30 Občerstvenie, Hotel Bellevue
- 16:30-16:55 Elsevier
Golkiewicz, Piotr
- 16:55-17:20
- 17:20-17:45
- 19:00-23:59 Slávnostný večierok s vyhodnotením posterovej súťaže, Hotel Bellevue
- Piatok**
11.09.2015
- 09:00-10:15
- 09:00-09:25
- 09:25-09:50
- 09:50-10:15
- 10:15-10:45 Občerstvenie, Hotel Bellevue
- 10:45-12:00 Panelová diskusia ako záver zjazdu
- 12:00-14:00 Obed, Hotel Bellevue

Sekcia 6: CHEMPROGRESS

Miestnosť: podľa plánu miestností na obálke (zelený farebný kód)

Utorok

08.09.2015

09:30-09:45 Slávnostné otvorenie Zjazdu, Sála Grand Bellevue

09:45-10:45 **Plenárna prednáška: Jean-Marie Lehn**

**PERSPECTIVES IN CHEMISTRY: FROM SUPRAMOLECULAR
CHEMISTRY TOWARDS ADAPTIVE CHEMISTRY**

10:45-12:00 Príhovory hostí zjazdu, Sála Grand Bellevue

12:00-14:00 Obed, Hotel Bellevue

14:20-15:10 **PP1: Ján Tkáč**

**APLIKÁCIA NANOMATERIÁLOV A IMOBILIZÁCIE
KONTROLOVANEJ V NANOŠKÁLE PRI PRÍPRAVE
ULTRACITLIVÝCH BIOSENZOROV A BIOPALIVOVÝCH ČLÁNKOV**

14:20-15:10 **PP2: Jiří Pospíšil**

**VÝVOJ NOVÝCH SYNTETICKÝCH POSTUPŮ A JEJICH APLIKACE
PŘI SYNTÉZE PŘÍRODNÍCH LÁTEK**

15:10-15:15 Presun z miestností pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií

15:15-15:25 Úvodné slová garantov k sekcii

15:25-18:00

15:25-15:50

15:50-16:15

16:15-16:45 Občerstvenie, Hotel Bellevue

16:45-17:10

17:10-17:35

17:35-18:00

18:00-20:00 Večera, Hotel Bellevue

19:00-21:00 Valné zhromaždenie SCHS , Hotel Bellevue

20:00-23:00 Postery a vínný večer , Hotel Bellevue

Streda

09.09.2015

09:00-09:50 **PP3: Ľubomír Švorc**

**VYUŽITIE NETRADIČNÝCH ELEKTRODOVÝCH MATERIÁLOV VO
FARMACEUTICKEJ A KLINICKEJ ANALÝZE**

09:00-09:50 **PP4: Daniela Šmogrovičová**

PIVO A ZDRAVIE-OD MÝTOV K VEDE

09:50-09:55 Presun z miestností pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií

09:55-12:00

09:55-10:20

10:20-10:45

10:45-11:10 Občerstvenie, Hotel Bellevue

11:10-11:35

11:35-12:00

12:00-13:30 Obed, Hotel Bellevue

13:30-18:00 Výlety

18:00-20:00 Večera, Hotel Bellevue

20:00-23:00 Postery a pivný večer , Hotel Bellevue

Štvrtok

10.09.2015

- 09:00-09:50 **PP5: Jozef Čársky**
205 ROKOV OD SMRTI A. RUPRECHTA
- 09:00-09:50 **PP6: Ján Imrich**
NOVÉ PROFLAVÍNY A SPIROCYKLY AKRIDÍNU AKO SĽUBNÉ DNA-
INTERKALÁTORY A ANTITUMOROVÉ LÁTKY
- 09:50-09:55 Presun z miestností pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií
- 09:55-12:00
- 09:55-10:20
- 10:20-10:45
- 10:45-11:10 Občerstvenie, Hotel Bellevue
- 11:10-11:35
- 11:35-12:00
- 12:00-12:25
- 12:30-14:00 Obed, Hotel Bellevue
- 14:20-15:10 **PP7: Ján Moncol'**
105 ROKOV CHEMICKEJ KRYŠTALOGRAFIE A PERSPEKTÍVY
- 14:20-15:10 **PP8: Elena Hájeková**
RECYKLÁCIA POLYMÉRNÝCH ODPADOV
- 15:10-15:15 Presun z miestností pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií
- 15:15-17:45 Predseda sekcie: Martin Bajus
- 15:15-15:40 6P01
Karel Bouzek, Jakub Polonský, Tomáš Bystroň
PEM ELEKTROLÝZA VODY - ASPEKTY SPOJENÉ S OPTIMALIZACÍ
ANODY
- 15:40-16:05 6P02
Michal Němeček, Roman Kodým, Karel Bouzek, Dalimil Šnita
DISTRIBUCE PROUDU V PILOTNÍ ELEKTRODIALÝZNÍ JEDNOTCE-
VLIV PRŮTOČNÉHO USPOŘÁDÁNÍ A NESYMETRIE PROVOZNÍCH
PODMÍNEK VSTUPNÍCH ROZTOKŮ
- 16:05-16:30 Občerstvenie, Hotel Bellevue
- 16:30-16:55 6P03
Monika Drakselová, Roman Kodým, Dalimil Šnita, Karel Bouzek
ANALÝZA ROVNOMĚRNOSTI TOKU HMOTY A NÁBOJE VE
SVAZKU VYSOKOTEPLTNÍHO PALIVOVÉHO ČLÁNKU TYPU PEM
POMOCÍ MATEMATICKÉHO MODELU
- 16:55-17:20 6P04
Filip Karas, Martin Paidar, Karel Bouzek
PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE VODÍKOVOU ELEKTRODOU
NESENÝCH ČLÁNKŮ PRO PROCES VYSOKOTEPLTNÍ
ELEKTROLÝZY VODY
- 17:20-17:45 6P05
Jaromír Hnát, Jan Žitka, Martin Paidar, Karel Bouzek
ALKALICKÁ ELEKTROLÝZA VODY VYUŽÍVAJÍCÍ ANION
SELEKTIVNÍ POLYMERNÍ MATERIÁLY OBSAHUJÍCÍ DABCO
FUNKČNÍ SKUPINY
- 19:00-23:59 Slávnostný večierok s vyhodnotením posterovej súťaže, Hotel Bellevue

Piatok

11.09.2015

09:00-10:15 Predseda sekcie: Karel Bouzek

09:00-09:25 6P06

Martin Prokop, Adam Giurg, Tomáš Bystroň, Martin Paidar, Karel Bouzek
THIN-FILM METHOD FOR HIGH TEMPERATURE PEM FUEL CELL
CATALYST CHARACTERIZATION

09:25-09:50 6P07

Jakub Mališ, Martin Paidar, Karel Bouzek
PERMEACE VODÍKU MEMBRÁNOU NAFION® 117 PŘI PEM
ELEKTROLÝZE VODY

09:50-10:15 6P08

Tomáš Weidlich, Jana Martinková, Miroslav Šimek
VYUŽITÍ IONTOVÉ VÝMĚNY PRO ODSTRAŇOVÁNÍ KYSELÝCH
BARVIV Z ODPADNÍCH VOD

10:15-10:45 Občerstvenie, Hotel Bellevue

10:45-12:00 Panelová diskusia ako záver zjazdu

12:00-14:00 Obed, Hotel Bellevue