

73. ZJAZD CHEMIKOV

6. – 10. september 2021
Vysoké Tatry, Horný Smokovec

HLAVNÍ ORGANIZÁTORI

Slovenská chemická spoločnosť a Česká společnost chemická



v spolupráci s



ORGANIZAČNÝ VÝBOR

Monika Jerigová – predsedníčka
Ľubomír Švorc - vedecký tajomník
Michaela Halinkovičová - hospodárka
Miroslav Michalka – výkonný tajomník
Michal Procházka - technický tajomník
Jan John - organizátor za ČSCH

PROGRAMOVÝ VÝBOR

RNDr. Monika Jerigová, PhD., (SChS)
doc. Ing. Ľubomír Švorc, PhD., (SChS)
prof. Ing. Peter Šimon, DrSc., (SChS)
prof. Ing. Viktor Milata, DrSc., (SChS)
doc. Ing. Zuzana Cibulková, PhD., (SChS)
Ing. Roman Fišera, PhD., (SChS)
RNDr. Robert Góra, PhD., (SChS)
doc. Ing. Ján Moncol, PhD., (SChS)
prof. RNDr. Renáta Oriňáková, DrSc., (SChS)
RNDr. Michal Procházka, PhD., (SChS)
doc. Ing. Ivan Šalitraš, PhD., (SChS)
RNDr. Eva Viglašová, PhD., (SChS)
doc. RNDr. Milan Drábik, PhD., (SChS)
RNDr. Dalma Gyepesová, CSc., (SChS)
Doc. RNDr. Magdaléna Bálintová, PhD., (TU KE)
Doc. RNDr. Andrej Boháč, CSc., (UK BA)
Mgr. Martin Danko, PhD., (SAV BA)
Doc. RNDr. Mária Ganajová, CSc., (UPJŠ, KE)
RNDr. Slávka Hamuľáková, PhD., (UPJŠ, KE)
Ing. Ján Hirsch, DrSc., (SAV BA)
Prof. Ing. Vasil Koprda, DrSc., (STU BA)
Doc. PaedDr. Katarína Kotuľáková, PhD., (TU TT)
Ing. Elena Kulichová, (SOŠ Nováky)
Doc. RNDr. Jozef Kuruc, PhD., (UK BA)
RNDr. Lenka Lorencová, PhD., (SAV BA)
Doc. Ing. Tomáš Mackuľák, PhD., (STU BA)
Doc. RNDr. Martin Putala, PhD., (UK BA)
Doc. Ing. Milena Reháková, PhD., (STU BA)
Doc. RNDr. Katarína Reiffová, CSc., (UPJŠ, KE)
Prof. Ing. Štefan Schmidt, PhD., (STU BA)
Prof. Mgr. Radovan Šebesta, DrSc., (UK BA)
Prof. RNDr. Nadežda Številová, PhD., (TU KE)
Doc. Ing. Radko Tiňo, PhD., (STU BA)
Prof. Ing. Michal Uher, DrSc., (STU BA)
Doc. RNDr. Zuzana Vargová, PhD., (UPJŠ, KE)
Doc. Ing. Dušan Velič, DrSc., (UK BA)
RNDr. Beata Vranovičová, PhD., (UCM TT)

SEKCIE ZJAZDU A GARANTI

- 1. Analytická chémia**
doc. Ing. Lubomír Švorc, PhD.
- 2. Fyzikálna chémia**
prof. Ing. Peter Šimon, DrSc.
- 3. Anorganická a materiálová chémia**
doc. Ing. Ján Moncol, PhD.
- 4. Organická chémia**
doc. RNDr. Martin Putala, PhD.
- 5. Vyučovanie a história chémie**
doc. RNDr. Jarmila Kmeťová, PhD.
- 6. Aplikovaná chémia, životné prostredie a polyméry**
doc. Ing. Radko Tiňo, PhD.
- 7. Chemprogress – chemické technológie**
prof. Ing. Ján Híveš, PhD.

Garanti súťaže posterov

doc. Ing. Zuzana Cibulková, PhD., RNDr. Eva Viglašová, PhD.

PLENÁRNA PREDNÁŠKA

Pavol Čekan

Vývoj kvantitatívnych a multiplexných diagnostických technológií a aplikácií

ZOZNAM POZVANÝCH PREDNÁŠOK

- PP1 **Renáta Oriňaková** Elektrochemické biosenzory – moderný a efektívny spôsob diagnostiky ochorení
- PP2 **Katarína Mikušová** Príbeh makozinónu – o ceste perspektívneho antituberkulotika z laboratória ku klinickým skúškam
- PP3 **Peter Szolcsányi** Syntéza a vlastnosti analógov vonných molekúl
- PP4 **Peter Kasak** Nanostructural platforms for sustainable energy and advanced applications
- PP5 **Ján Matyašovský** Organická syntéza ako dôležitý nástroj chemickej biológie

OBSAH

ZOZNAM PREDNÁŠOK A POSTEROV PODĽA SEKCIÍ

Plenárna prednáška 68

| | |
|--|----|
| VÝVOJ KVANTITATÍVNYCH A MULTIPLEXNÝCH DIAGNOSTICKÝCH TECHNOLOGIÍ A APLIKÁCIÍ <u>Pavol Čekan</u> , Monika Radvánska, Adrián Szobi, Evan Paul | 68 |
|--|----|

Pozvané prednášky 69

| | |
|---|----|
| PP1 ELEKTROCHEMICKÉ BIOSENZORY - MODERNÝ A EFEKTÍVNY SPÔSOB DIAGNOSTIKY OCHORENÍ <u>Renáta Oriňaková</u> , Jana Shepa, Ivana Šišoláková..... | 69 |
| PP2 PRÍBEH MAKOZINÓNU – O CESTE PERSPEKTÍVNEHO ANTITUBERKULOTIKA Z LABORATÓRIA KU KLINICKÝM SKÚŠKAM <u>Katarína Mikušová</u> | 69 |
| PP3 SYNTÉZA A VLASTNOSTI ANALÓGOV VONNÝCH MOLEKÚL <u>Peter Szolcsányi</u> , Peter Šiška, Eva Puchľová, Michal Dendys, Vladimír Dacho | 70 |
| PP4 NANOSTRUCTURAL PLATFORMS FOR SUSTAINABLE ENERGY AND ADVANCED APPLICATIONS <u>Peter Kasak</u> | 70 |
| PP5 ORGANICKÁ SYNTÉZA AKO DÔLEŽITÝ NÁSTROJ CHEMICKEJ BIOLÓGIE <u>Ján Matyašovský</u> a Michal Hocek..... | 71 |

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

| | |
|---|----|
| 1P01 SPEKTROELEKTROCHEMIE JAKO NÁSTROJ PRO CHARAKTERIZACI NOVÝCH UMĚLÝCH ENZYMŮ SLOUŽÍCÍCH K ANALÝZE VYBRANÝCH NEUROTRANSMITERŮ <u>Romana Sokolová</u> , Jana Kocábová, Milan Sýs, Tomáš Mikysek, Jan Fiedler, Ilaria Degano | 72 |
| 1P02 KONFORMAČNÍ, SPEKTRÁLNÍ A ELEKTROCHEMICKÁ ANALÝZA INSULINU <u>Libuše Trnková</u> , Iveta Třísková, Nikola Nosková | 72 |
| 1P03 ELEKTROCHEMICKÁ OXIDACE STEROLŮ S DVOJNOU VAZBOU NA STEROIDNÍM SKELETU A JEJÍ VYUŽITÍ V ELEKTROANALÝZE Eva Bláhová, Jan Klouda, Jana Kubešová, Kristýna Jelšíková, Dominika Giampaglia, Lenka Benešová, Michal Zelenský, Karolina Schwarzová-Pecková..... | 73 |
| 1P04 DETEKČIA STRIEBRA V KOMERČNÝCH PRODUKTOCH NA ELEKTRÓDE Z DIAMANTU DOPOVANÉHO BÓROM: ELEKTROCHEMICKÁ ROZPÚŠŤACIA ANALÝZA PRI ZNÍŽENOM POTENCIÁLI ZA PRÍTOMNOSTI TIOSÍRANOVÝCH IÓNOV. <u>Peter Tomčík</u> , Eva Culková, Zuzana Lukáčová-Chomisteková, Renata Bellová, Miroslav Rievaj..... | 73 |

| | |
|--|----|
| 1P05 SLEDOVANIE VPLYVU MATRICE POTU NA INTERAKCIU VYBRANÝCH NANOČASTÍČ S DNA <u>Jana Blaškovičová</u> , Andrea Pečová, Veronika Svitková..... | 74 |
| 1P06 CHARAKTERIZACE A VLIV ÚROVNĚ DOPOVÁNÍ BÓREM NA ELEKTROCHEMICKÉ VLASTNOSTI CHEMICKO-MECHANICKY LEŠTĚNÝCH A NELEŠTĚNÝCH POLYKRISTALICKÝCH BÓREM DOPOVANÝCH ELEKTROD <u>Michal Zelenský</u> , Jan Fischer, Simona Baluchová, Andrew Taylor, Vincent Mortet, Ladislav Fekete, Ladislav Klímša, Jaromír Kopeček, Soumen Mandal, Oliver A. Williams and Karolina Schwarzová-Pecková..... | 75 |
| 1P07 APPLICATION OF GREEN METHOD FOR EXTRACTION OF NATURAL BIOACTIVE COMPOUNDS <u>Katarína Hroboňová</u> , Michal Jablonský, Soňa Malečková | 75 |
| 1P08 PROBLEMATIKA SEPARACE THIOFOSFÁTOVÝCH ANALOGŮ TERAPEUTICKÝCH OLIGONUKLEOTIDŮ A JEJICH DIASPEREOMERŮ V KAPALINOVÉ CHROMATOGRFII (1. ČÁST – ÚVOD) <u>Květa Kalíková</u> , Zuzana Kadlecová, Martin Gilar..... | 76 |
| 1P09 PROBLEMATIKA SEPARACE THIOFOSFÁTOVÝCH ANALOGŮ TERAPEUTICKÝCH OLIGONUKLEOTIDŮ A JEJICH DIASPEREOMERŮ V KAPALINOVÉ CHROMATOGRFII (2. ČÁST – VÝSLEDKY) <u>Zuzana Kadlecová</u> , Martin Gilar, Květa Kalíková..... | 76 |
| 1P10 SPOJENÍ KAPALINOVÉ MIKROEXTRAKCE DO DUTÉHO VLÁKNA S VOLTAMETRICKOU ANALÝZOU <u>Vojtěch Hrdlička</u> , Tomáš Navrátil | 77 |
| 1P11 VLIV KATALYTICKÉHO VYLUČOVÁNÍ VODÍKU A SEKVENCE DNA NA REDUKCI GUANINOVÝCH A CYTOSINOVÝCH ZBYTKŮ NA RTUŤOVÝCH ELEKTRODÁCH Miroslav Fojta..... | 77 |
| 1P12 ELEKTROCHEMICKÁ A SPEKTROSKOPICKÁ DETEKČIA INTERAKČIE RÔZNYCH ŠTRUKTÚR DNA S G-KVADRUPLIXOVÝM LIGANDOM <u>Daniel Dobrovodský</u> , Aleš Daňhel, Miroslav Fojta..... | 78 |
| 1P13 PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE INKLUZNÍCH KOMPLEXŮ β -CYKLODEXTRINU S KYSELINOU OLEJOVOU A NITRO-OLEJOVOU <u>David Novák</u> , Martin Kabeláč, Barbora Komárková, Martina Zatloukalová, Jan Vacek..... | 78 |
| 1P14 CE-ICP-MS: ANALÝZA ULTRASTOPOVÝCH KONCENTRACÍ ENANTIOMERŮ OXALIPLATINY A JEJICH NEČISTOT <u>Tomáš Pluháček</u> , Daniel Baron, Petra Švecová, Andrea Šebestová, Radka Pechancová, Jan Petr..... | 79 |
| 1P15 AUTOMATIZOVANÉ ANALYTICKÉ SYSTÉMY A ICH VYUŽITIE PRI ANALÝZE ORGANICKÝCH LÁTOK <u>Marek Haššo</u> , Eubomír Švorc | 80 |
| 1P16 ELEKTROCHEMICKÁ IMPEDANČNÍ SPEKTROSKOPIE NA VRSTVÁCH POLYSTYRENOVÝCH NANOČASTÍČ <u>Jakub Sopoušek</u> , Karel Lacina | 80 |

| | |
|---|-----------|
| 1P17 ELEKTROANALÝZA OLIGO-G RNA V ZMESI S 3',5'-CYKlickÝM GUANOZÍN MONOFOSFÁTOM ZA VYUŽITIA SELEKTÍVNEJ DESORPCIE MONOMÉROV Z POVRCHU ELEKTRÓDY <u>Ondrej Hesko</u> , Miroslav Fojta, Jan Špaček | 81 |
| 1P18 ELEKTROCHEMICKÁ CHARAKTERIZACE NITROVANÝCH MASTNÝCH KYSELIN A JEJICH INTERAKCE S VYBRANÝMI NUKLEOFILY <u>Martina Zatloukalová</u> , David Novák, Jan Vacek | 82 |
| 1P19 VOLTAMERICKÉ STANOVENÍ LÉČIVA ATOMOXETINU S VYUŽITÍM LABORATORNĚ PŘIPRAVENÉHO TIŠTĚNÉHO SENZORU S CHEMICKY DEPONOVANOU BOREM DOPOVANOU DIAMANTOVOU ELEKTRODOU <u>Renata Šešesková</u> , Tomáš Navrátil, Oleksandr Matvieiev, Marian Vojs, Pavol Michniak, Marián Marton, Jaromíra Chýlková, Lenka Janíková | 82 |
| 1P20 ELECTROCHEMICAL ANALYSIS OF HISTONES AT THE CHARGED ELECTRODE SURFACE <u>Eva Melníková</u> , Olívia Dakošová, Tatiana Gálicová, Miroslav Gál, Veronika Ostatná | 83 |
| 1P21 SLEDOVANIE ZMIEN GLYKÁNOVÉHO ZLOŽENIA SÉR A PLAZMY VO VZORKÁCH TEHOTENSKEJ CUKROVKY NA LEKTÍNOCH ZALOŽENOU MICROARRAY METÓDOU Lucia Pažitná, Kristína Kianičková, Paras Kundalia, Zorana Dobrijević, Nikola Gligorijević, Goran Miljuš, Ana Penezić, Dragana Robajac, Miloš Šunderić, Olgica Nedić, Vesna Mandić Marković, Željko Miković, Ognjen Radojičić, Jaroslav Katrlík | 83 |
| 1P22 SLEDOVANÍ GLYKÁNOVÝCH PROFILOV HCG AKO IDENTIFIKÁCIA REZISTENCIE BUNKOVÝCH LÍNIÍ NA CIS-PLATINU <u>Michal Híreš</u> , Eduard Jáné, Michal Mego, Michal Chovanec, Katarína Hainová, Peter Kasák, Tomáš Bertók, Ján Tkáč | 84 |
| 1P23 NEJISTOTA MĚŘENÍ V CHEMII - SOUČASNÉ TRENDY <u>David Milde</u> | 84 |
| 1P24 ELEKTRÓDA Z DIAMANTU DOPOVANÉHO BÓROM AKO VOLTAMPÉROMETRICKÝ SENZOR PRE CETIRIZÍN <u>Eva Culková</u> , Zuzana Lukáčová-Chomisteková, Renata Bellová, Danica Melicherčíková, Jaroslav Durdiak, Miroslav Rievaj, Peter Tomčík | 85 |
| 1P25 DETECTION OF ZAG GLYCOPROTEIN AS A POTENTIAL PROSTATE CANCER BIOMARKER <u>Štefánia Hrončeková</u> , Tomáš Bertók, Ján Tkáč | 85 |
| 1P26 GLYCOMIC TECHNOLOGY FOR GLYCO-TARGET DISCOVERY <u>Juvisan Aguedo</u> , Lenka Lorencova, Zuzana Pakanova, Jan Tkac | 86 |
| 1P27 INTERAKCE IONTŮ RTUTI S HOMOTHYMINOVÝMI ÚSEKY DNA NA RTUŤOVÉ ELEKTRODĚ <u>Monika Hermanová</u> , Zuzana Soldánová, Hana Pivoňková, Miroslav Fojta | 86 |
| Prednášky - Sekcia 2: Fyzikálna chémia | 87 |
| 2P01 KDE SA VZALI CHEMICKÉ PRVKY VO VESMÍRE Martin Venhart | 87 |

| | |
|---|----|
| 2P02 PISTON COMPRESSION OF SEMIFLEXIBLE RING POLYMERS IN CHANNELS <u>Peter Cifra, Tomáš Bleha</u> | 87 |
| 2P03 ŠTRUKTÚRNE KOMPLEXNÉ INTERMETALICKÉ FÁZY V SYSTÉME AL-PD-CO <u>Ivona Černíčková, Libor Ďuriška, Marek Mihalkovič, Peter Švec, Sr., Peter Švec, Pavol Priputen, Marián Drienovský, Jozef Janovec</u> | 88 |
| 2P04 MIKROŠTRUKTÚRA, FÁZOVÉ ZLOŽENIE A ELEKTROCHEMICKÁ AKTIVITA ZLIATIN NA BÁZE HLINÍKA <u>Libor Ďuriška, Marián Palcut, Ivona Černíčková, Martin Sahul, Ľubomír Čaplovič, Jozef Janovec,</u> | 88 |
| 2P05 UHLÍKOVÉ VLÁKNA DOPOVANÉ FOSFIDMI PRECHODNÝCH KOVOV AKO KATÓDOVÉ KATALYZÁTORY PRE ELEKTROLYZÉRY <u>Alexandra Gubóová, Renáta Oriňaková, Magdaléna Strečková, Ondrej Petruš</u> | 89 |
| 2P06 EFFECT OF SOLVENT ON CHARGE TRANSPORT IN SINGLE MOLECULE JUNCTIONS <u>Magdaléna Hromadová, Štěpánka Nováková Lachmanová, Viliam Kolivoška, Jakub Šebera, Jindřich Gasior, Grégory Dupeyre, Gábor Mészáros, Philippe P. Lainé</u> | 89 |
| 2P07 STUDY OF WEAK NONSPECIFIC INTERACTIONS BETWEEN NATURAL AND SYNTHETIC SUBSTANCES WITH ISOTHERMAL TITRATION CALORIMETRY <u>Volodymyr Lobaz, Edyta Wawrzyńska, Kristyna Kolouchova, Monika Holubova, Martin Hruby</u> | 90 |
| 2P08 ELEKTROCHEMICKÁ AKTIVITA KATÓDOVÉHO MATERIÁLU Z RECYKLOVANÝCH BATÉRIÍ <u>Veronika Niščáková, Dominika Capková, Andrea Straková Fedorková, Soňa Hatokova, Miroslav Čigaš, Štefan Hanigovský</u> | 90 |
| 2P09 CHARAKTERIZÁCIA MIKROMETEORITOV POMOCOU HMOTNOSTNEJ SPEKTROMETRIE <u>Nováková Justína, Valíček Michal, Buček Andrej, Velič Dušan, Jerigová Monika</u> | 91 |
| 2P10 MIKROŠTRUKTÚRA, FÁZOVÉ ZLOŽENIE A ELEKTROCHEMICKÁ AKTIVITA VYSOKOENTROPICKÝCH ZLIATIN <u>Marián Palcut, Pavol Priputen, Imrich Czere, Karolína Dvorštiaková, Žaneta Gerhátová, Martin Sahul</u> 92 | |
| 2P11 ŠTÚDIUM VPLYVU POLYMÉRNEHO POVLAKU NA DEGRADÁCIU BIOMATERIÁLOV NA BÁZE ŽELEZA <u>Martina Petráková, Renáta Oriňaková, Radka Gorejová, Andrej Oriňak</u> | 92 |
| 2P12 EXPERIMENTÁLNE A VÝPOČTOVÉ MERANIA HETEROGÉNNEJ KATALYTICKEJ HYDROGENÁCIE OXIDU UHLIČITÉHO NA METANOL <u>Natália Podrojková, Renáta Oriňaková, Andrej Oriňak</u> | 93 |
| 2P13 SOL-GEL-BASED 2D PRINTED LUMINESCENT MATERIAL <u>M. Žitňan, M. Blaško, J. J. Velázquez, L. Müller, L. Wondraczek, D. Galusek</u> | 93 |
| 2P14 THERMOPOWER AS AN INTRINSIC PROPERTY OF MOLECULAR JUNCTIONS: SUPPORTING RESULTS OF SIMULTANEOUS STUDY OF ELECTRIC AND THERMOELECTRIC PROPERTIES OF SELECTED MODEL MOLECULES <u>František Vavrek, Jakub Šebera, Olena Butsyk, Viliam Kolivoška, Štěpánka Nováková Lachmanová, Táňa Sebechlebská, Gábor Mészáros, Magdaléna Hromadová</u> | 94 |

| | |
|---|-----|
| 2P15 PHYSICO-CHEMICAL STUDY OF MULTI-RESPONSIVE PORPHYRIN-POLYMER CONJUGATES <u>Nadiia Velychkivska</u> , Ondřej Sedláček, Jonathan P. Hill and Jan Labuta | 95 |
| 2P16 BIODEGRADOVATELNÝ CELULÁRNY KOVOVÝ MATERIÁL MODIFIKOVANÝ POVLAKOM GLYCEROL CITRÁTU <u>Ján Macko</u> , Tibor Sopčák, Radka Gorejová, Renáta Oriňaková, Andrej Oriňak | 95 |
| 2P17 STRUKTURNÍ ZMĚNY MOLEKULÁRNÍCH TYČÍ PŘI PŘENOSU ELEKTRONU <u>Lubomír Pospíšil</u> , Magdaléna Hromadová, Jiří Kaleta, Guillaume Bastien, Štěpánka Nováková, Jan Tarábek, Igor Rončević..... | 96 |
| 2P18 “NON-INNOCENT“ LIGANDY V NI-KOMPLEXOCH <u>Jozef Kožíšek</u> | 96 |
| Prednášky - sekcia 3: Anorganická a materiálová chémia..... 98 | |
| 3P01 VPLYV GEOMETRIE KOORDINAČNÉHO POLYEDRA A NEKOVALENTNÝCH INTERAKCIÍ NA MAGNETIZMUS JEDNO-MOLEKULOVÝCH MAGNETOV <u>Radovan Herchel</u> , Pavel Zoufalý, Kamil Kotrle, Ivan Nemeč, Bohuslav Drahoš..... | 98 |
| 3P02 INTERACTION OF HASTELLOY-N AND HASTELLOY-G35 ALLOYS WITH VAPOURS GENERATED FROM MOLTEN FLINAK SALT <u>Ramu Ambati</u> , Viliam Pavlik, Miroslav Boca | 98 |
| 3P03 MECHANOCHEMICAL SYNTHESIS OF SULFIDES AS POTENTIAL THERMOELECTRIC MATERIALS <u>Peter Baláž</u> , Matej Baláž, Marcela Achimovičová..... | 99 |
| 3P04 VPLYV HYDROTERMÁLNYCH PODMIENOK NA VLASTNOSTI CEMENTOVÝCH SPOJÍV Eva Kuzielová, <u>Zora Hajdúchová</u> , Matúš Žemlička | 99 |
| 3P05 SYNTHESIS AND MOLECULAR MAGNETISM IN PENTACOORDINATE CO (II) COMPLEXES WITH PENDANT ALKYL CHAINS <u>Jana Juráková</u> , Ján Pavlik, Ján Moncol, Petr Neugenbauer, Denis Gentili, Massimiliano Cavallini, Ivan Šalitroš. | 100 |
| 3P06 FERROCENOVÉ BIS-FOSFINY OBSAHUJÍCÍ FOSFATRIOXAADAMANTANOVOU FUNKČNÍ SKUPINU: EFEKTIVNÍ KATALYZÁTORY PRO C-H ARYLACI BENZOXAZOLŮ <u>Filip Horký</u> , Ivana Císařová, Petr Štěpnička | 101 |
| 3P07 MODIFIKACE OPTICKÝCH VLASTNOSTÍ TENKÝCH VRSTEV CHALKOGENIDOVÝCH SKEL DEPONOVANÝCH METODOU SPIN-COATING POMOCÍ DOPOVÁNÍ VÝCHOZÍHO ROZTOKU <u>Jiří Jančálek</u> , Stanislav Šlang, Michal Kurka, Karel Pálka, Miroslav Vlček..... | 101 |
| 3P08 BIO-INSPIRED STRUCTURES BASED ON POLYMER GRAFTED GO: A TOOL TO UPGRADE EPOXY/CARBON FIBRE COMPOSITE. <u>Ivan Kelnar</u> , Miroslav Janata | 102 |

| | |
|--|-----|
| 3P09 INVESTIGATION OF SELECTED LANTHANIDE TRIFLUORIDES IN MOLTEN EUTECTIC MIXTURE LiF-MgF_2 <u>Blanka Kubikova</u> , Jarmila Mlynáriková, Zuzana Netriová, Miroslav Boča | 102 |
| 3P10 DOPOVÁNÍ CHALKOGENIDOVÝCH VRSTEV SLOŽENÍ $\text{AS}_{33}\text{S}_{67}$ STRĚBRNÝMI IONTY <u>Michal Kurka</u> , Jirí Jančálek, Stanislav Šlang, Karel Pálka, Miroslav Vlček..... | 103 |
| 3P11 SLOW RELAXATION OF MAGNETISATION IN MONONUCLEAR COBALT(II) COMPLEXES Jana Juráková, Barbora Brachňaková, Ján Moncol', <u>Ivan Šalitraš</u> | 103 |
| 3P12 ŠTRUKTÚRNE A MAGNETICKÉ VLASTNOSTI KOMPLEXOV ŽELEZA OBSAHUJÚCE NOVÉ TYPY SCHIFFOVÝCH BÁZ <u>Terézia Lalahová</u> , Ján Titiš, Cyril Rajnák, Roman Boča | 104 |
| 3P13 TERNARY PHASES IN THE SYSTEMS $(\text{LiF}-\text{CaF}_2)_{\text{EUT}}-\text{X}\{\text{LaF}_3, \text{NDF}_3, \text{SMF}_3, \text{GDF}_3\}$ <u>Oksana Matselko</u> , Jarmila Mlynáriková, Iveta Macková, Zuzana Netriová, Miroslav Boča | 104 |
| 3P14 HĽADANIE FENOMÉNU SPIN-CROSSOVER V JEDNOJADROVÝCH Fe(III) KOMPLEXOCH TVORENÝCH IMINO ALEBO AMINO LIGANDMI <u>Romana Mičová</u> , Cyril Rajnák, Ján Moncol', Eubor Dlháň, Christoph Krüger, Franz Renz, Roman Boča, Milan Gembický | 105 |
| 3P15 PRÍPRAVA, CHARAKTERIZÁCIA A ŠTÚDIUM BIOLOGICKEJ AKTIVITY MEĎNATÝCH KOMPLEXOV S NSAID A RÔZNYMI N-DONOROVÝMI LIGANDAMI <u>Milan Piroš</u> , Ján Moncol', Jozef Švorec | 106 |
| 3P16 SYNTÉZA A KRYŠTÁLOVÁ ŠTRUKTÚRA NOVÝCH RUTENATÝCH KOORDINAČNÝCH ZLÚČENÍN S NSAID LIGANDAMI <u>Martin Schoeller</u> , Ján Moncol' | 106 |
| 3P17 UNDERESTIMATED CLASS OF COMPLEX OXIDES: ION MOVEMENT IN PYROXENES <u>Olha Skurikhina</u> , Bernhard Gadermaier, Marcela Achimovicova, H. Martin R. Wilkening | 107 |
| 3P18 BIOLOGICKÉ ÚČINKY KOMPLEXOV STRIEBRA VO VZŤAHU K ICH ŠTRUKTÚRE <u>Zuzana Vargová</u> , Michaela Rendošová, Gabriela Kuzderová..... | 107 |
| 3P19 Fe(II) COMPLEXES WITH N-DONOR HETEROCYCLIC LIGANDS <u>Alexandra Šagátová</u> , Jakub Orvoš, Ivan Šalitraš | 108 |
| 3P20 HIERARCHICKY PORÉZNÍ UHLÍKATÉ MONOLITY <u>Václav Slovák</u> , Tomáš Zelenka, Gabriela Zelenková, Eva Kinnertová, Lucie Kořená, Madhav Chavhan..... | 108 |
| 3P21 CHARAKTERIZACE PORÉZNÍCH MATERIÁLŮ FYZISORPCÍ PLYNŮ – DŮLEŽITÉ EXPERIMENTÁLNÍ ASPEKTY <u>Tomáš Zelenka</u> | 109 |
| 3P22 TERMICKÝ ROZKLAD AMONNÝCH SOLÍ POMOCÍ TG-MS <u>Gabriela Zelenková</u> , Václav Slovák..... | 109 |
| 3P23 ISOKYANOFERROCEN A JEHO KARBENOVÉ KOMPLEXY <u>Petr Vosáhl</u> , Michal Franc, Petr Harmach, Ivana Císařová, Petr Štěpnička..... | 109 |

| | |
|---|-----|
| 3P24 SYNTHESIS AND COORDINATION BEHAVIOUR OF NEW FERROCENE A-AMINOBIS(PHOSPHINE) <u>Michal Navrátil</u> , Ivana Císařová, Petr Štěpnička | 110 |
|---|-----|

| | |
|---|-----|
| 3P25 KOMPLEXY KOVOV PRI LIEČBE A DIAGNOSTIKE RAKOVINY <u>Ján Moncol'</u> | 110 |
|---|-----|

Prednášky - sekcia 4: Organická chémia 112

| | |
|--|-----|
| 4P01 STEREOSELEKTÍVNA MANNICHOVA REAKCIA V SYNTÉZE β -AMINOKETÓNOV <u>Michaela Čierna</u> , Oľga Caletková, Dušan Berkeš, Pavol Jakubec | 112 |
|--|-----|

| | |
|---|-----|
| 4P02 ASYMETRICKÁ MICHAELOVA ADÍCIA NA HETEROCYKlickÉ NITROALKÉNY VYUŽÍVAJÚCA HYBRIDNÝ PEPTIDOMOČOVINOVÝ KATALYZÁTOR <u>Patricia Čmelová</u> , Radovan Šebesta | 112 |
|---|-----|

| | |
|---|-----|
| 4P03 ACHIEVING STEREOCONTROL OF SUZUKI DIARYLATION AT POSITIONS 2,2' OF 1,1'-BINAPHTHYLS <u>Martin Putala</u> , Filip Bulko | 113 |
|---|-----|

| | |
|---|-----|
| 4P04 HYDRODEBROMACE POLYBROMOVANÝCH AROMATICKÝCH KONTAMINANTŮ KATALYZOVANÁ MĚDÍ ZA LABORATORNÍ TEPLoty A ATMOSFÉrickÉHO TLAKU <u>Tomáš Weidlich</u> , Barbora Kamenická, Petr Švec | 113 |
|---|-----|

| | |
|--|-----|
| 4P05 DRUG-LIKE LIGANDS FOR DC-SIGN RECEPTOR <u>Petra Ménová</u> | 114 |
|--|-----|

| | |
|--|-----|
| 4P06 SYNTÉZA 9-JODMETHYLADENINU A 8-[² H]-9-JODMETHYLADENINU PRO STUDII VZNIKU NEKANONICKÝCH NUKLEOVÝCH BAZÍ A NUKLEOSIDŮ PŘI IONIZACI DNA <u>Gabriela Nováková</u> , Aleš Marek, František Tureček | 114 |
|--|-----|

| | |
|---|-----|
| 4P07 3,6,9-TRISUBSTITUOVANÉ AKRIDÍNOVÉ DERIVÁTY A ICH DNA VÄZBOVÁ A BIOLOGICKÁ AKTIVITA <u>Mária Kožurková</u> , Ladislav Janovec, Patrik Nunhart, Eva Konkoľová, Rastislav Jendželovský, Jana Vargová, Juraj Ševc, Mária Matejová, Beáta Miltáková, Peter Fedoročko | 115 |
|---|-----|

| | |
|--|-----|
| 4P08 GRADIENT COPOLYMERS FROM ALIPHATIC AND AROMATIC 2-OXAZOLINES WITH DIFFERENT ARCHITECTURE AS ADVANCED DRUG DELIVERY SYSTEMS <u>Juraj Kronek</u> , Rushita Shah, Zuzana Kroneková, Veronika Huntošová, Shubhashis Datta, Daniel Jancura, Pavol Miškovský | 116 |
|--|-----|

| | |
|---|-----|
| 4P09 RATIONAL DESIGN OF TETRAZINES FOR BIOORTHOGONAL CHEMISTRY <u>Michal Májek</u> , Matej Trtúšek | 116 |
|---|-----|

| | |
|--|-----|
| 4P10 NOVEL PHOTOISOMERISABLE LIGANDS FOR SPIN-CROSSOVER COMPLEXES <u>Jakub Orvoš</u> , Róbert Fischer, Barbora Brachňáková, Ivan Šalitroš | 117 |
|--|-----|

| | |
|---|-----|
| 4P11 5-PHENYLAZOPYRIMIDINES PROBED BY NMR SPECTROSCOPY WITH IN SITU IRRADIATION Lucie Mužíková Čechová, Juraj Filo, Martin Dračínský, Zlatko Janeba, Marek Cigáň, <u>Eliška Procházková</u> | 117 |
|---|-----|

| | |
|---|-----|
| 4P12 COPPER MEDIATED PHOTO-ATRP UNDER SPECIFIC POLYMERIZATION CONDITIONS <u>Jaroslav Mosnáček</u> , Jozef Kollár, Dmitrij Bondarev, Ana Hološ, Gamal Zain, Rubina Karim, Anita Eckstein, Katarína Borská, Daniela Moravčíková | 118 |
| 4P13 PHOSPHORUS BASED SELF-IMMOLATIVE LINKERS Markéta Tichotová, Petr Šimon, Juraj Filo, Marek Cigán, Eliška Procházková, <u>Ondřej Baszczyński</u> .. | 119 |
| 4P14 VIDITEĽNÝM SVETLOM INICIOVANÝ KROS-KAPLING KATRITZKÉHO SOLÍ A NITROSTYRÉNOV <u>Michaela Marčeková</u> , Branislav Ferko, Katarína Ráchel Detková, Dušan Berkeš a Pavol Jakubec..... | 119 |
| 4P15 DITHIENYLNAPHTHALENES AND QUATERTHIOPHENES AS N-TYPE ORGANIC SEMICONDUCTORS IN OFET <u>Lucia Feriancová</u> , Martin Putala | 120 |
| 4P16 FUNCTIONALIZATION OF BRIDGED CYCLOALKANES <u>Radim Hrdina</u> | 120 |
| 4P17 FLUORINATED AZIDOALKANES – PREPARATION, STABILITY AND UTILIZATION IN SYNTHESIS <u>Petr Beier</u> , Athanasios Markos, Svatava Voltrová, Olga Bakhanovich, David Tichý, Lukáš Janecký .. | 121 |
| 4P18 INDUKOVANÉ ŠTIEPENIE N-N A C-F VÄZIEB AROMATICKÝCH FLUÓROVANÝCH HYDRAZÓNOV Dušan Bortňák, Daniel Végh, Jakub Šofranko, Branislav Pavilek, Viktor Milata..... | 122 |
| 4P19 THERMALLY-INDUCED TRANSFORMATION OF 1-FLUOROALKYL-1,2,3-TRIAZOLES <u>Svatava Voltrová</u> , Athanasios Markos, Petr Beier..... | 122 |
| 4P20 SYNTÉZA TETRAHYDROXYLOVANÝCH SPIROINDOLIZIDÍNŮV <u>Paula Fraňová</u> , Štefan Marchalín, Peter Šafář..... | 123 |
| Prednášky - sekcia 5 Vyučovanie a história chémie..... 124 | |
| 5P01 KONCEPCIA PRÍRODOVEDNÉHO VZDELÁVANIA PRE ZÁKLADNÚ ŠKOLU <u>Katarína Kotuláková</u> , Lubomír Held | 124 |
| 5P02 ALTERNATÍVNE UČEBNICE CHÉMIE PRE ZÁKLADNÚ ŠKOLU <u>Lubomír Held</u> , Katarína Kotuláková | 124 |
| 5P03 HISTÓRIA CHEMICKÉHO PRIEMYSLU NA SLOVENSKU DOPÍSANÁ <u>Michal Uher</u> , Viktor Milata, Ludovít Hallon, Miroslav Sabol..... | 125 |
| 5P04 AUGMENTED COOPERATION IN EDUCATION AND TRAINING IN NUCLEAR AND RADIOCHEMISTRY <u>Martin Šácha</u> , J. John, M. Němec | 125 |
| 5P05 TVORBA PROFESIJNE ORIENTO VANÉHO ŠTUDIJNÉHO PROGRAMU „CHEMICKÝ LABORANT ŠPECIALISTA“ NA ÚCHV PF UPJŠ <u>Zuzana Vargová</u> , Miroslav Almáši, Michaela Rendošová, Renáta Oriňaková, Slávka Hamuláková, Rastislav Varháč, Viktor Víglaský, Jana Šandrejová, Mária Ganajová | 126 |

| | |
|--|-----|
| 5P06 VYUČOVANIE PRÍRODOVEDY PROSTREDNÍCTVOM VÝSKUMNE LADENEJ KONCEPCIE Miroslava Jurečková, <u>Jarmila Kmeťová</u> | 126 |
| 5P07 FORMATÍVNE HODNOTENIE VO VÝUČBE PRÍRODNÝCH VIED, MATEMATIKY A INFORMATIKY <u>Mária Ganajová</u> , Ivana Sotáková | 127 |
| 5P08 "ORIGAMI" PRO CHEMII A SMARTPHONE <u>Michal Lach</u> , Jiří Kalina, Kateřina Trčková..... | 127 |
| 5P09 FOTOKATALÝZA – PODPŮRNÉ MATERIÁLY SŠ <u>Kateřina Němcová</u> , Václav Slovák | 128 |

| | |
|--|------------|
| Prednášky - sekcia 6 Aplikovaná chémia, životné prostredie a polyméry | 129 |
|--|------------|

| | |
|--|-----|
| 6P01 IN CLOAKA VERITAS – ČO VIEME VYČÍTAŤ Z ODPADOVÝCH VÔD <u>Igor Bodík</u> , Dóra Varjúová, Tomáš Mackuľak | 129 |
| 6P02 OVĚŘOVÁNÍ PRŮBĚHU ÚPRAVY VOD PRO TEPLÁRENSTVÍ POMOCÍ POTENCIOMETRIE S AMALGAMY STŘÍBRA <u>Ladislav Novotný</u> , Aneta Karásková, Petr Mikulášek | 129 |
| 6P03 ÚLOHA SÍRANOV PRI DEGRADÁCIÍ TEXTILNÝCH A PAPIERENSKÝCH FARBÍV ANODICKOU OXIDÁCIU <u>Gabriela Kuchtová</u> , Libor Dušek | 130 |
| 6P04 ADSORPCIA FARMACEUTÍK Z ODPADOVÝCH VÔD POMOCOU AKTÍVNEHO UHLIA <u>Daniela Pavúková</u> , Lucia Fašková, Ladislav Štibrányi, Ján Hivěš | 130 |
| 6P05 POROVNANIE ÚČINNOSTI SORPČNÝCH MATERIÁLOV PRI ODSTRAŇOVANÍ PÄŤMOCNÉHO ARZÉNU Z VODY <u>Ronald Zakhar</u> , František Čacho, Ján Derco, Viliam Vretenár | 130 |
| 6P06 SELEKTIVNÍ ODSTRAŇOVÁNÍ NEŽÁDOUCÍCH OXOANIONTŮ Z VODNÝCH ROZTOKŮ <u>Lenka Matoušková</u> , Helena Parschová | 131 |
| 6P07 HYBRIDNÍ NANOČÁSTICE S ANORGANICKÝM JÁDREM A POLYMERNÍM OBALEM PRO BIOMEDICÍNU: PŘÍKLADY Z ÚMCH <u>Martin Hrubý</u> | 131 |
| 6P08 ADSORPČNÍ STUDIE POLYFLUOROVANÉHO PROTIZÁNĚTLIVÉHO LÉČIVA FLUFENAMOVÉ KYSELINY NA UHLÍKATÝCH SORBENTECH <u>Barbora Kamenická</u> , Tomáš Weidlich, Pavel Matějček..... | 132 |
| 6P09 VPLYV PODMIENOK SPRACOVANIA NA ZNIŽOVANIE OBSAHU CHOLESTEROLU V MLIEKU A SMOTANE POMOCOU BETA-CYKLODEXTRÍNU <u>Lukáš Kolarič</u> , Peter Šimko | 132 |
| 6P10 NOSIČE LÉČIV NA BÁZI AMFIFILNÍCH KOPOLYMERŮ <u>Vít Herynek</u> , Lenka Loukotová, Tomáš Heizer, Tereza Bělinová, Martin Hrubý | 133 |

| | |
|---|-----|
| 6P11 FLUORINATED DISELENIDE BASED SELF ASSEMBLY NANOPARTICLES FOR CANCER TREATMENT <u>M. Vetrík</u> , L. Kobera, R. Konefal, J. Kucka, V. Lobaz, E. Pavlova, J. Brus, G. Pratz, M. Hruby..... | 133 |
| 6P12 LIPIDOVÉ A POLYMERNÍ NANOČÁSTICE PRO DOPRAVU DERIVÁTŮ NAFTOCHINONŮ JAKO POTENCIÁLNÍ LÉČIVA LUPÉNKY A NÁDORŮ <u>Tereza Ulrichová</u> | 134 |
| 6P13 PHOSPHOROTHIOATE GROUPS-CONTAINING POLYMER AS A PIONEERING METAL-FREE CONTRAST AGENT FOR ³¹ P-MRI <u>Lucie Woldřichová</u> , Natalia Ziólkowska, Richard Laga, Ladislav Androvič, Iveta Klimánková, David Červený, Martin Vít, Petr Pompach, Rafał Konefał, Olga Janoušková, Martin Hrubý, Daniel Jiráček | 135 |
| 6P14 HYBRID POLYMER-COLLOID SYSTEMS AS MRI-DETECTABLE NANOCARRIERS FOR VACCINE DELIVERY <u>Richard Laga</u> , Lucie Woldřichová, Ladislav Androvič, Michal Babič, Monika Paúrová, Marcela Filipová, David Červený, Daniel Jiráček..... | 135 |
| 6P15 PĚT LET SPOLUPRÁCE ÚMCH S 1. LF UK (CAPI), POŽADAVKY NA VZORKY PRO <i>IN</i> <i>VIVO</i> TESTOVÁNÍ <u>Jan Kučka</u> Martin Hrubý, Petr Štěpánek, Luděk Šefc, Pavla Poučková | 136 |
| 6P16 SULFOBETAINE-BASED POLYDISULFIDES WITH TUNABLE UPPER CRITICAL SOLUTION TEMPERATURE (UCST) IN WATER ALCOHOLS MIXTURE <u>Jozef Kollár</u> , Anton Popelka, Jaroslav Mosnáček, Peter Kasák..... | 136 |
| 6P17 AKCELERÁTORY NA BÁZI ŽELEZA PODÍLEJÍCÍ SE NA VYTVRZOVÁVNÍ NENASYCENÝCH POLYMERŮVÝCH PRYSKYŘIC PŘI TEPLOTĚ OKOLÍ <u>Eliška Matušková</u> , Jan Honzíček, Jaromír Vinklárček | 137 |
| 6P18 CONTROLLED ENCAPSULATION AND RELEASE BY CHARGE REGULATION AND MULTIVALENT INTERACTIONS WITH SUPRAMOLECULAR POLYMER CARRIERS Hanna Zhukouskaya, <u>Zulfiya Černochová</u> , Marcela Filipová, Miroslav Vetrík, Martin Hrubý, Peter Černoch, Miroslav Šlouf, Jiří Pánek | 137 |
| 6P19 MECHANICAL AND VISCOELASTIC PROPERTIES OF NOVEL FULLY BIODEGRADABLE PLA/PHB BLENDS FILLED WITH KERATIN <u>Katarína Mosnáčková</u> , Alena Opálková Šišková, Angela Kleinová, Martin Danko, Jaroslav Mosnáček | 138 |
| 6P20 VLASTNOSTI A ŠTRUKTÚRA P3HB-CO-4HB STRÚN PRE 3D TLAČ <u>Zdenko Špitálský</u> , Mária Kováčová, Adriana Kovalčík..... | 138 |
| 6P21 NOVÉ PRÍSTUPY K DEACIFIKACII A KONZERVÁCII CELULOZOVÝCH OBJEKTŮ KULTÚRNEHO DEDIČSTVA <u>Radko Tiňo</u> , Katarína Vizárová, Milan Králik, Soňa Malečková, Jana Jurišová | 139 |
| 6P22 MECHANOCHEMIA: EFEKTÍVNY NÁSTROJ NA PREMENU ODPADOV NA FUNKČNÉ MATERIÁLY | |
| 6P23 AKO DOSIAHNUŤ ANTIBAKTERIÁLNY ÚČINOK POLYMÉRNÝCH (NANO)KOMPOZITOV POMOCOU SVETLA? <u>Mária Kováčová</u> , Zdenko Špitálský | 140 |

| | |
|---|-----|
| 6P24 INFLUENCE OF LANTHANUM OXIDE NANOPARTICLES ON THE USEFUL PROPERTIES OF A WATERBORNE COATING BINDER BASED ON SELF-CROSSLINKING ACRYLATE LATEX <u>Denisa Steinerová, Andréa Kalendová, Jana Machotová</u> | 140 |
| 6P25 WATERBORNE HYGIENIC COATINGS BASED ON SELF-CROSSLINKING ACRYLIC LATEX WITH EMBEDDED INORGANIC NANOPARTICLES: A COMPARISON OF NANOSTRUCTURED ZNO AND MGO AS ANTIBACTERIAL ADDITIVES <u>Jana Machotová, Andréa Kalendová, Denisa Steinerová</u> | 141 |
| 6P26 SKÚMANIE POVÝBUCHOVÝCH SPODÍN PYROTECHNICKÝCH VÝROBKOV V PÔDE <u>Zuzana Melichová, Ivana Majerčáková, Jozef Kobza</u> | 141 |
| 6P27 EXCHANGE COUNTERION IN POLYCATIONIC HYDROGELS: TUNABILITY OF HYDROPHOBICITY, WATER STATE AND FLOATING CAPABILITY <u>Martin Danko, Zuzana Kronekova, Igor Krupa, Jan Tkac, Peter Kasak</u> | 142 |
| 6P28 INTERACTIONS BETWEEN OLIGOPEPTIDES AND CHARGED STAR POLYMERS INVESTIGATED BY ADVANCED ANALYSIS OF (LIFETIME) CORRELATION SPECTROSCOPY <u>Jiří Pánek, Petr Štěpánek, Peter Černocho, Peter Košovan, Martin Hrubý</u> | 142 |
| 6P29 FLUORIDOVÉ TERČOVÉ MATRICE PRO STANOVENÍ ²³⁶ U URYCHLOVAČOVOU HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIÍ <u>Tomáš Prášek, Mojmír Němec, Marcus Christl, Philip Gautschi, Christof Vockenhuber</u> | 143 |
| 6P30 TESTOVÁNÍ FLUORIDOVÝCH TERČOVÝCH MATRIC PRO STANOVENÍ ²⁶ AL METODOU AMS <u>Kateřina Fenclová, Tomáš Prášek, Mojmír Němec, Marcus Christl, Philip Gautschi, Christof Vockenhuber</u> | 143 |
| 6P31 VYUŽITIE STANOVENIA ¹²⁹ I URYCHLOVAČOVOU HMOTNOSTNOU SPEKTROMETRIU VO FORENZNEJ ANALÝZE <u>Miriám Mindová, Martin Daňo, Mojmír Němec</u> | 144 |

Prednášky - sekcia 7 Chemprogress – chemické technológie 145

| | |
|---|-----|
| 7P01 ZLEPŠENÍ VÝKONU ALKALICKÉ ELEKTROLÝZY VODY S VYUŽITÍM ANION SELEKTIVNÍ MEMBRÁNY MODIFIKOVANÉ NEPLATINOVÝMI KATALYZÁTORY <u>Michaela Plevová, J. Hnát, J. Žitka, M. Paidar, K. Bouzek</u> | 145 |
| 7P02 Ni-Fe A Ni-W ELEKTROKATALYZÁTORY VÝVOJA VODÍKA <u>Jana Záchenská, Matilda Zemanová</u> | 145 |
| 7P03 VLIV KONCENTRACE KOH NA PROVOZ ALKALICKÉ ELEKTROLÝZY VODY: POROVNÁNÍ ANION-SELEKTIVNÍ MEMBRÁNY A PORÉZNÍ DIAFRAGMY <u>Karel Denk, Roman Kodým, Jaromír Hnát, Jan Žitka, Martin Paidar, Karel Bouzek</u> | 146 |
| 7P04 KATODOVÝ KATALYZÁTOR NICOP PRO ALKALICKOU ELEKTROLÝZU VODY: STRUKTURNÍ A ELEKTROCHEMICKÁ CHARAKTERIZACE <u>Martin Ďurovič, Jaromír Hnát, Karel Bouzek</u> | 146 |

| | |
|--|------------|
| 7P05 NÁVRH TECHNOLOGIE ENERGETICKÝCH MATERIÁLŮ V AUSTIN DETONATOR <u>Lhotka M.</u> , Mastný L., Musil T., Vala R..... | 147 |
| 7P06 PLYNOVĚ-DIFÚZNÍ VRSTVA A JEJÍ ROLE V PROVOZNÍCH CHARAKTERISTIKÁCH PALIVOVÉHO ČLÁNKU TYPU PEM Monika Drakselová, Veronika Rečková, Martin Prokop a <u>Karel Bouzek</u> | 147 |
| 7P07 POROVNÁNÍ RŮZNÝCH KATALYZÁTORŮ PRO PEM PALIVOVÉ ČLÁNKY A OPTIMALIZACE JEJICH DEPOZICE NA MEMBRÁNU METODOU ULTRAZVUKOVÉHO NANÁŠENÍ <u>Jakub Malíš</u> , Veronika Marková, Olívia Čobejová, Martin Paidar, Karel Bouzek | 148 |
| 7P08 PŘÍPRAVA A VLASTNOSTI YSZ KERAMICKÝCH ELEKTROLYTŮ PRO VYSOKOTEPLNÍ REVERZIBILNÍ ČLÁNKY S PEVNÝMI OXIDY <u>Michal Carda</u> , Nela Adamová, Daniel Budáč, Martin Paidar, Karel Bouzek | 148 |
| 7P09 SIMULÁCIA PRIENIKU DEACIDIFIKAČNÝCH KOMPONENTOV DO PAPIERA <u>Vladimír Danielík</u> , Milan Králik, Marta Ambrová, Jana Jurišová, Katarína Vizárová..... | 149 |
| 7P10 STEAM EXPLOSION AND STEAM EXTRUSION PRETREATMENT AS AUXILIARY METHODS FOR CONCENTRATION ENHANCEMENT OF MONOSACCHARIDES FROM HYDROLYSATES BASED ON SELECTED LIGNOCELLULOSIC MATERIALS <u>Andrej Pažitný</u> , Michal Halaj, Albert Russ, Štefan Boháček, Vladimír Ihnát, Ida Skotnicová, Štefan Šutý | 149 |
| 7P11 EXPERIMENTÁLNÍ STUDIUM ROVNOMĚRNOSTI DISTRIBUCE TOKU ELEKTRICKÉHO PROUDU V PILOTNÍM ELEKTRODIALYZÉRU <u>Roman Kodým</u> , Michal Němeček, Dalimil Šnita, Karel Bouzek..... | 150 |
| 7P12 ŽELEZAN – OCHRANCA BEZPEČNÉHO ŽIVOTNÉHO PROSTREDIA Ján Híveš, Kamil Kerekeš, Emília Mališová, Tomáš Mackuľak, Miroslav Gál | 150 |
| Cena Marty Sališovej | 152 |
| CMS01 OXIDOREDUCTASE-BASED MINI-REACTOR COUPLED WITH SILVER SOLID AMALGAM ELECTRODE AS THE PERSPECTIVE BIOSENSING PLATFORM IN FLOW ANALYSIS <u>Sofia Tvorynska</u> , Jiří Barek, Bohdan Josypčuk | 152 |
| CMS02 STRIEBORNÉ NANOČASTICE AKO PERSPEKTÍVNE NOSIČE LIEČIV <u>Veronika Svitková</u> , Katarína Nemčeková, Jozef Sochr, Ján Labuda | 152 |
| CMS03 APTAMER-MODIFIED PENCIL GRAPHITE ELECTRODES FOR THE IMPEDIMETRIC DETERMINATION OF OCHRATOXIN A <u>Katarína Nemčeková</u> , Gültekin Gökçe, Sondes Ben Aissa, Gaëlle Catanante, Noureddine Raouafi, Jean- Louis Marty..... | 153 |
| CMS04 EFFECT OF THERMORESPONSIVE POLY(2-OXAZOLINE)S ON FORMATION OF DEXAMETHASONE MICROPARTICLES | |
| CMS05 MONOKRYŠTALICKÉ DIAMANTOVÉ ELEKTRODY S RÔZNOU ÚROVŇOU DOPOVANIA BÓROM <u>Simona Baluchová</u> , Karolína Schwarzová-Pecková, Luděk Míka, Jan Fischer, Ladislav Fekete, Ladislav Klimša, Jaromír Kopeček, Vincent Mortet, Andrew Taylor | 154 |

| | |
|--|-----|
| CMS06 ELECTROCHEMICAL DETERMINATION OF LIPASE ACTIVITY AND CONCENTRATION IN PHARMACEUTICAL PREPARATIONS <u>Olha Sarakhman</u> , Nadine Wenninger, Anita Rogala, Kurt Kalcher, Lubomír Švorc, Astrid Ortner..... | 155 |
| CMS07 ROZLOŽITEĽNÉ ORTOPEDICKÉ IMPLANTÁTY NA BÁZE ZINKU MODIFIKOVANÉ POLYMÉRNÝM POVĽAKOM <u>Radka Gorejová</u> , Renáta Oriňaková, Ondrej Petruš, Tibor Sopčák, Viktória Čákyová, Andrej Oriňak | 155 |
| CMS08 EFFECT OF FLAVONOIDS ON COPPER INDUCED OXIDATIVE STRESS <u>Miriama Šimunková</u> , Zuzana Barbieriková, Klaudia Jomová, Michal Malček, Marián Valko | 156 |
| CMS09 ULTRACITLIVÁ DETEKČIA AUTOPROTIĽÁTKOV VOČI ABERATNÝM GLYKÁNOM PRÍTOMNÝCH PRI RAKOVINOVÝCH OCHORENIACH <u>Anna Blšáková</u> , Filip Květoň, Lenka Lorencová, Ján Tkáč | 157 |
| CMS10 DESIGN OF A VOLTAMMETRIC SENSOR FOR NITRIC OXIDE BASED ON MODIFIED CARBON PASTE ELECTRODES Nadine Wenninger, Christina Bernhart, Urska Bracic, Alexander Kollau, Kingkan Pungjunun, Kurt Kalcher, Astrid Ortner..... | 158 |
| Postery - sekcia 1 Analytická a fyzikálna chémia 159 | |
| 1Po01 COMPARISON OF TWO DIFFERENT METHODS OF PROTEOME ISOLATION FROM OPIUM POPPY <u>Kristýna Kundrátová</u> , <u>Martin Bartas</u> , Petr Pečinka, Vladislav Čurn, Jiří Červeň | 159 |
| 1Po2 GC-MSD ANALÝZA DERIVÁTOV 2-DEOXY SACHARIDOV <u>Jaroslav Blaško</u> , Róbert Kubinec, Ludmila Gabrišová, Oliver Macho, Rastislav Hrčka, Lubomíra Duháčková, Janka Kubincová, Marek Kunštek, Jozef Višňovský | 159 |
| 1Po03 VLIV SLOŽENÍ MOBILNÍ FÁZE NA RETENCI A SEPARACI N-BLOKOVANÝCH DIPEPTIDŮ NA STACIONÁRNÍ FÁZI S „MIX-MODE“ CHARAKTEREM <u>Hana Boudová</u> , Zuzana Kadlecová, Květa Kalíková | 160 |
| 1Po04 ELEKTROCHEMICKÁ OXIDACE DERIVÁTŮ FENOLU NA BOREM DOPOVANÉ DIAMANTOVÉ ELEKTRODĚ TERMINOVANÉ KYSLÍKEM <u>Hana Dejmková</u> , Šárka Sládková, Karolina Schwarzová | 160 |
| 1Po05 VLIV SÉRIOVÉHO ZAPOJENÍ KOLON NA BÁZI MAKROCYKlickÝCH GLYKOPEPTIDŮ NA ENANTIOSEPARACI BIOLOGICKY AKTIVNÍCH LÁTEK V SUB/SUPERKRITICKÉ FLUIDNÍ CHROMATOGRÁFII <u>Denisa Folprechtová</u> , Eva Tesařová, Květa Kalíková | 161 |
| 1Po06 CYCLIC VOLTAMMETRY STUDY OF SELECTED IRON(II) BASED COMPLEXES WITH PYRIDYL BENZIMIDAZOLE LIGANDS Eva Melníková, <u>Miroslav Gál</u> , Olívia Dakošová, Barbora Brachňaková, Ivan Šalित्रोश | 161 |
| 1Po07 CHARAKTERIZÁCIA ELEKTROCHEMICKÉHO SENZORA PRE STANOVENIE INZULÍNU PRIPRAVENÉHO METÓDOU KOLOIDNEJ LITOGRAFIE <u>Radka Gorejová</u> , Ivana Šišoláková, Ondrej Petruš, Jana Shepa, Renáta Oriňaková | 162 |
| 1Po08 MODERNÍ TECHNOLOGIE VE VÝZKUMU A OCHRANĚ KULTURNÍHO A UMĚLECKO-HISTORICKÉHO DĚDICTVÍ <u>Tomáš Ingr</u> , Lukáš Kučera, Tomáš Opletal, Karel Lemr | 162 |

| | |
|---|-----|
| 1Po09 REDOXNÍ CHOVÁNÍ CHENODEOXYCHOLOVÉ A CHOLOVÉ KYSELINY V OBLASTI POZITIVNÍCH A NEGATIVNÍCH POTENCIÁLŮ <u>Kristýna Jelšíková</u> , Jan Klouda, Karolina Schwarzová-Pecková | 163 |
| 1Po10 ELEKTROCHEMICKÉ VLASTNOSTI 3-FLUOROFENMETRAZINU <u>Eliška Jiroušková</u> , Romana Sokolová, Radomír Čabala | 163 |
| 1Po11 VÝVOJ A TESTOVANIE INOVATÍVNEJ METÓDY NA STANOVENIE 5-HYDROXY-L-TRYPTOFÁNU PRI DIAGNOSTIKE KOLOREKTÁLNEHO KARCINÓMU <u>Dominik Juračka</u> , Michal Galamboš, Zoltán Krascsenits, Darina Tóthová | 164 |
| 1Po12 GLYCOPROFILING OF THE SARS-COV-2 SPIKE GLYCOPROTEIN <u>Jaroslav Katrlík</u> , Lucia Pažitná, Paras Kundalia, Kristína Kianičková, Marek Nemčovič, Peter Baráth, Zuzana Pakanová | 164 |
| 1Po13 GLYKOPROFILÁCIA PEŮCNEHO TKANIVA <u>Kristína Kianičková</u> , Lucia Pažitná, Paras Kundalia, Peter Baráth, Zuzana Pakanová, Filip Květoň, Pavol Janega, Jaroslav Katrlík | 165 |
| 1Po14 MATERIÁLOVÉ HODNOCENÍ VYBRANÝCH MAGNETICKÝCH A NEMAGNETICKÝCH FRAKCIÍ POPELA PO SPALOVÁNÍ UHLÍ S OHLEDEM NA OBSAHY MAJORITNÍCH SLOŽEK <u>Filip Kovára</u> Lucie Bartoňová..... | 165 |
| 1Po15 APPLICATION OF MICROMANIPULATION AND LASER DESORPTION IONIZATION MASS SPECTROMETRY IN ANALYSIS OF PEA SEED COAT <u>Petra Krejčí</u> , Monika Cechová-Zajacová, Petr Smýkal, Jana Balarynová, Petr Bednář..... | 166 |
| 1Po16 PRÍPRAVA ČISTÝCH SUBSTANCIÍ METÓDOU VYTESŇOVACEJ PREPARATÍVNEJ CHROMATOGRAFIE <u>Róbert Kubinec</u> , Jaroslav Blaško, Ľudmila Gabrišová, Oliver Macho, Rastislav Hrčka, Ľubomíra Duháčková, Janka Kubincová, Marek Kunštek, Jozef Višňovský | 166 |
| 1Po17 PREDÚPRAVA A STANOVENIE ZMESI PAH V RÔZNYCH TYPOCH VZORIEK <u>Elena Kupcová</u> , Barbora Benická | 167 |
| 1Po18 OPTIMALIZÁCIA DERIVATIZÁCIE GLYKÁNOV URČENÝCH K ANALÝZE KYSELINY SIALOVEJ ZO VZORIEK SÉRA <u>Filip Květoň</u> , Zuzana Pakanová, Marek Nemčovič, Ján Mucha | 167 |
| 1Po19 PERSPEKTÍVNE IMOBILIZAČNÉ PLATFORMY NA BÁZE POKROČILÝCH 2D NANOROZMERNÝCH MXÉNOVÝCH ROZHRANÍ PRE NÁVRH (BIO)SENZOROV <u>Lenka Lorencová</u> , Veronika Pinková Gajdošová, Štefánia Hrončeková, Tomáš Bertók, Peter Kasák, Ján Tkáč | 168 |
| 1Po20 ELECTROCHEMICAL PROPERTIES OF A LAB-MADE SCREEN-PRINTED SENSORS WITH CHEMICALLY DEPOSITED BORON DOPED DIAMOND ELECTRODE <u>Oleksandr Matvieiev</u> , Renáta Šelešovská, Marian Vojs, Pavol Michniak, Marin Vrška, Jaromíra Chýlková..... | 169 |
| 1Po21 DETERMINATION OF TRACE ELEMENTS IN PURE MANAGANESE MATRIX USING INDUCTIVELY COUPLED PLASMA OPTICAL EMISSION SPECTROMETRY (ICP-OES) <u>Frederika Mišíková</u> , Lucie Borovská, Anna Krejčová..... | 169 |

| | |
|--|-----|
| 1Po22 POTENCIÁL KOMBINÁCIE HYDROFILNEJ INTERAKČNEJ KVAPALINOVEJ CHROMATOGRAFIE A IÓNOVEJ CHROMATOGRAFIE V SEPARÁCII GLYKOPEPTIDOV <u>Katarína Molnárová</u> , Petr Kozlík | 170 |
| 1Po23 GC-MS ANALÝZA OXIDAČNÍCH PRODUKTŮ CHENODEOXYCHOLOVÉ KYSELINY <u>Jana Nádvořníková</u> , Petr Barták, Jana Skopalová | 170 |
| 1Po24 STABILITY AND APPLICABILITY OF FOUR POPULAR 3D PRINTING MATERIALS IN ELECTROANALYTICAL CHEMISTRY Marta Choinška, <u>Tomáš Navrátil</u> , Jan Fischer, Hana Dejmková, Luděk Míka, Viliam Kolivoška | 171 |
| 1Po25 ELECTROCHEMICAL METHODS FOR DETERMINATION OF FENTANYL, ITS ANALOGUES AND DERIVATIVES Marta Choinška, <u>Tomáš Navrátil</u> , Jan Langmaier, Jana Skopalová, Vítězslav Maier | 171 |
| 1Po26 SPECTROSCOPIC BINDING STUDIES OF NEUROBLASTOMA DISEASE MARKERS BY NOVEL THIOPHENE BASED RECEPTORS- PRECURSORS FOR THE ELECTROCHEMICAL SENSORS' PREPARATION <u>Jakub Marián Pálež</u> , Karolína Salvadori, Tatiana V. Shishkanova, Petra Cuřínová | 172 |
| 1Po27 GLYKOPROFILÁCIA SÉR POMOCOU MICROARRAY A MALDI-TOF MS U PACIENTIEK S RAKOVINOU PRSNÍKA <u>Veronika Pinková Gajdošová</u> , Lucia Pažitná, Filip Květoň, Eduard Jane, Zuzana Pakanová, Lenka Lorencová, Peter Baráth, Jaroslav Katrlík, Ján Tkáč | 172 |
| 1Po28 VLIV NUKLEOTIDOVÉ SEKVENČE, SEKUNDÁRNÍ STRUKTURY A PROSTŘEDÍ NA VOLTAMETRICKÉ CHOVÁNÍ HOMOCYTOSINOVÝCH BLOKŮ <u>Hana Pivoňková</u> , Miroslav Fojta..... | 173 |
| 1Po29 STUDIUM VLIVU REDOXNÍ PŘEMĚNY NITRO SKUPINY NA VAZEBNÉ VLASTNOSTI RECEPTORŮ NA BÁZI MOČOVIN <u>Karolína Salvadori</u> , Ludmila Šimková, Jiří Ludvík, Pavel Matějka, Petra Cuřínová..... | 173 |
| 1Po30 ELEKTROCHEMICKÁ OXIDACE A VOLTAMETRICKÉ STANOVENÍ FENTANYLŮ Radek Jerga, Dana Štolbová, Monika Zajacová Cechová, Petr Barták, <u>Jana Skopalová</u> | 174 |
| 1Po31 SEPARATION IN FLOW-BASED METHODS: CURRENT STATUS <u>Petr Solich</u> , Petr Chocholouš, Dalibor Šatinský..... | 174 |
| 1Po32 AMPEROMETRICKÝ SENZOR DETEKČIE INZULÍNU PRIPRAVENÝ METÓDOU KOLOIDNEJ LITOGRAFIE <u>Ivana Šišoláková</u> , Ondrej Petruš, Jana Shepa, Renáta Oriňaková..... | 175 |
| 1Po33 VYUŽITÍ INDOXYLACETÁTU JAKO SUBSTRÁTU PRO ACETYLCHOLINESTERÁZU <u>Šárka Štěpánková</u> , Kristýna Votočková, Katarína Svrčková | 175 |
| 1Po34 INOVATIVNÉ PRÍSTUPY V DIAGNOSTIKE KARCINÓMU PROSTATY <u>Natália Švecová</u> , Tomáš Bertók, Lenka Lorencová, Ján Tkáč..... | 176 |
| 1Po35 APPLICATION OF BORON-DOPED DIAMOND BASED SENSORS FOR FOOD ANALYSIS <u>Marek Haššo</u> , Alžbeta Benková, Andrea Pinkeová, Miroslava Štefčáková, Olha Sarahman, Ľubomír Švorc | 176 |

| | |
|--|-----|
| 1Po36 PHOSPHATE-CONTAINING SELF-IMMOLATIVE LINKERS FOR DOUBLE CARGO RELEASE <u>Markéta Tichotová</u> , Petr Šimon, María García Gallardo, Ondřej Baszczyński, Eliška Procházková | 177 |
| 1Po37 TWO AND THREE ELECTRODE SETUPS FOR IMPEDANCE BIOSENSING: CHARGE AND IONIC STRENGTH <u>Jakub Věžník</u> , Jakub Sopoušek, Libuše Trnková, Karel Lacina | 177 |
| 1Po38 ISOLATION OF TRANS-2,CIS-6-NONADIENAL BY FLASH CHROMATOGRAPHY <u>Veronika Výbohová</u> , Nikola Bakardžiev, Katarína Hroboňová..... | 178 |
| 1Po39 AFFINITY BASED HIGH-THROUGHPUT DETERMINATION OF ABBERANT GLYCOSYLATION IN CANCER <u>Paras Kundalia</u> , Lucia Pažitná, Kristína Kianičková, Jaroslav Katrlík | 178 |
| 1Po40 DETERMINATION OF SELECTED PESTICIDE RESIDUES IN STRAWBERIES USING GC-MS <u>Andrea Purdešová</u> , Zuzana Kramplová, Jozef Sokol | 179 |

Postery - sekcia 2 Fyzikálna chémia 180

| | |
|---|-----|
| 2Po01 ŠTÚDIUM POVRCHOVÝCH VLASTNOSTÍ SAPONÍNŮV IZOLOVANÝCH Z HEDERA HELIX <u>Martin Bajcura</u> , Miloš Lukáč | 180 |
| 2Po02 A FAST PROCEDURE FOR PRELIMINARY EVALUATION OF THE EFFECTS OF DIFFERENT AGEING TYPES ON THE THERMOOXIDATIVE STABILITY OF MATERIALS <u>Zuzana Cibulková</u> , Anna Vykydalová, Tibor Dubaj, Peter Šimon | 180 |
| 2Po03 VOLTAMETRICKÉ CHOVÁNÍ DOPAMINU A SEROTONINU NA BOREM DOPOVANÉ DIAMANTOVÉ ELEKTRODĚ <u>Jan Fischer</u> , Michaela Pejzlová, Simona Baluchová, Karolina Schwarzová..... | 181 |
| 2Po04 IDENTIFIKÁCIA AKRYLAMIDU V ZRNKÁCH KÁVY POMOCOU HMOTNOSTNEJ SPEKTROMETRIE SEKUNDÁRNYCH IÓNOV <u>Lujza Grambličková</u> , Monika Jerigová..... | 181 |
| 2Po05 SPECTROSCOPIC AND THEORETICAL STUDIES OF ANTI-SYN ISOMERIZATION ACROSS THE –N–N= BOND <u>Michal Hricovíni</u> , James Asher and Miloš Hricovíni..... | 182 |
| 2Po06 THE ROLE OF SUBSTITUTION PATTERN ON MOLECULAR STRUCTURE AND NMR PARAMETERS IN GLYCOSAMINOGLYCANS Michal Hricovíni and <u>Miloš Hricovíni</u> | 182 |
| 2Po07 PLNE OPTICKÝ THz SENZOR PRE DETEKCIU PRIEMYSELNÝCH TOXICKÝCH LÁTOK <u>Dusan Lorenc</u> , Eva Noskovicova, Justina Novakova, Monika Jerigova, Dusan Velic | 183 |
| 2Po08 GRAPHENE QUANTUM DOTS DOPED WITH TRANSITION METALS AND THEIR POTENTIAL USE IN HYDROGEN ENERGY <u>Michal Malček</u> , Lukáš Bučinský, Maria Natália Dias Soeiro Cordeiro | 183 |

| | |
|---|-----|
| 2Po09 POST-IONIZÁCIA METEORITOV V TOF SIMS HMOTNOSTNOM SPEKTROMETRI <u>Eva Noskovičová</u> , Justína Nováková, Vojto Szöcs, Eduard Jáné, Dušan Lorenc, Monika Jerigová, Dušan Velič..... | 184 |
| 2Po10 STUDIUM KATALYTICKÉ AKTIVITY NANOČÁSTIC PLATINY <u>Miroslav Orság</u> , Libor Kvítek, Robert Pucek, Aleš Panáček..... | 184 |
| 2Po11 MALDI-TOF/TOF ANALÝZA SACHARIDOVÝCH ZLOŽIEK LIPOPOLYSACHARIDU Z BAKTÉRIE <i>VIBRIO CHOLERAE O139</i> <u>Filip Pančík</u> , Zuzana Pakanová, Jana Mečárová, Alžbeta Čížová, Slavomír Bystrický, Stanislav Kozmon, Peter Baráth..... | 184 |
| 2Po12 REDOX BEHAVIOR OF COPPER(II) COMPLEXES WITH THIOSEMICARBAZONES AS POTENTIAL ANTICANCER DRUGS STUDIED BY CYCLIC VOLTAMMETRY AND IN SITU SPECTROELECTROCHEMISTRY <u>Peter Rapta</u> | 185 |
| 2Po13 ŠTÚDIUM MECHANIZMU OXIDÁCIE INZULÍNU NA ELEKTRÓDACH MODIFIKOVANÝCH NANOČASTICAMI OXIDU NIKELNATÉHO <u>Katarína Sisáková</u> , Ivana Šišoláková, Jana Shepa, Renáta Oriňaková..... | 186 |
| 2Po14 TOXICITY AND BIODISTRIBUTION OF NANOPARTICLES <u>Peter Šimon</u> , Tibor Dubaj, Zuzana Cibulková..... | 186 |
| 2Po15 ROLE DENATURACE/RENATURACE VE STRUKTUŘE INZULINU <u>Iveta Třísková</u> , Nikola Nosková, Libuše Trnková..... | 187 |
| 2Po16 THE CHARACTERISATION OF EPOXIDES WITH FLAME RETARDANTS BY TESTING OF FLAMMABILITY <u>Anna Vykydalová</u> , Jozef Rychlý, Edita Matysová, Zdenko Špitálsky..... | 187 |
| 2Po17 RUTHENIUM-NITROSYL COMPLEXES WITH DIMETHYL-1H-PYRAZOLE LIGANDS: INSIGHTS INTO THE REDOX CHEMISTRY AND VIS LIGHT-INDUCED NO RELEASE <u>Michal Zalibera</u> , Samuel Láhký, Iryna Stepanenko, Vladimír B. Arion..... | 188 |
| Postery - sekcia 3 Anorganická a materiálová chémia..... 189 | |
| 3Po01 SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF COBALT(II) DICARBOXYLATES PREPARED FROM DISODIUM MALONATE WITH <i>N</i> -DONOR LIGANDS <u>Marek Brezovan</u> , Ján Moncol, Ján Pavlik, Ľubor Dlháň, Peter Segľa..... | 189 |
| 3Po02 ŠTÚDIUM KINETIKY LÚHOVANIA MECHANICKY AKTIVOVANÉHO NAUMANITU AG ₂ SE <u>Katarína Gáborová</u> , Marcela Achimovičová, Pavel Škácha, María Florencia Márquez-Zavalía, Oľga Šestinová..... | 189 |
| 3Po03 POTENCIONÁLNE BIOLOGICKY ZAUJÍMAVÉ IÓNOVÉ KOMPLEXY ZINKU S NITRODERIVÁTMI 8-HYDROXYCHINOLÍNU <u>Michaela Harmošová</u> , Natália Kuncová, Erika Samoľová, Miroslava Litecká, Ivan Potočňák..... | 190 |
| 3Po04 OBNOVENÍ ANTIBAKTERIÁLNIČ ÚČINKŮ NEAKTIVNÍCH ANTIBIOTIK VŮČI REZISTENTNÍM BAKTERIÍMPO KOMBINACI S KYANOGRAFEN/STŘÍBRNÝM NANOHYBRIDEM <u>Lucie Hochvaldova</u> , Renáta Večeřová, Milan Kolář, Libor Kvítek, Aleš Panáček..... | 190 |

| | |
|--|-----|
| 3Po05 ROZKLAD CHLOROVANÝCH UHLOVODÍKŮ TECHNOLOGIÍ MSO Vojtěch Galek, Anna Černá, Petr Pražák, Jan Hadrava, <u>Jan Horníček</u> , Libor Mastný..... | 191 |
| 3Po06 TOXICITA PEDOT: PSS MATERIÁLŮ <u>Šárka Hradilová</u> , Kateřina Poláková, Sepil Tekoglu..... | 191 |
| 3Po07 EXPERIMENTÁLNÍ MOŽNOSTI STUDIA SOL-GEL POLYKONDENZACE RESORCINOLU S FORMALDEHYDEM <u>Eva Kinnertová</u> , Václav Slovák, Roman Maršálek, Martin Mucha | 192 |
| 3Po08 POST-SYNTETICKÁ MODIFIKÁCIA MICROPÓROVITÉJ METAL-PORFYRINÁTOVEJ SIETE PRE ADSORPCIU PLYNOV <u>Nikolas Király</u> , Miroslav Almáši, Vera Meynen, Vladimír Zelenák | 192 |
| 3Po09 VLIV POVRCHOVÉ CHEMIE NA MNOŽSTVÍ NEMRZNOUCÍ VODY V PORÉZNÍM UHLÍKU <u>Lucie Kořená</u> , Irene Lamata..... | 193 |
| 3Po10 HETEROLEPTIC NI(II) COMPLEX WITH ENHANCED ZERO-FIELD SPLITTING PARAMETER <u>Lenka Krešáková</u> , Mariia Holub, Alvaro Werner, Erik Čižmár, Larry R. Falvello, Juraj Černák | 193 |
| 3Po11 CO ₂ HYDROGENACE NA KATALYZÁTORECH NA BÁZI OXIDŮ ŽELEZA <u>Martina Kubíková</u> , Libor Kvítek, Robert Pucek, Aleš Panáček | 194 |
| 3Po12 FLUORESCENT NANODIAMONDS MODIFIED WITH BIOCOMPATIBLE POLYMERS <u>Klaudia Kvaková</u> , Martin Ondra, Jiří Schimer, Miroslav Topper, Miloš Petřík, Zbyněk Nový, Helena Raabová, Marián Hajdúch, Petr Cígler | 194 |
| 3Po13 POLYMERNÍ VRSTVY S NANOČÁSTICEMI STRĚBRA <u>Libor Kvítek</u> , Barbora Štefková, Aleš Panáček, Robert Pucek..... | 195 |
| 3Po14 SYNTHESIS AND STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF POTENTIAL ANTINEOPLASTIC RUTHENIUM COMPLEXES CONTAINING CURCUMINOIDS <u>Janka Leskovská</u> , Jindra Valentová, Eva Fischer-Fodor, Natalia Miklášová..... | 195 |
| 3Po15 TESTOVÁNÍ ANTIBAKTERIÁLNÍ AKTIVITY POVRCHŮ DLAŽDIC TVRZENÉHO KAMENE <u>Libor Mastný</u> , Renáta Slavětínská, Jana Říhová Ambrožová | 196 |
| 3Po16 CYANOGRAPHENE@Ag NANOCOMPOSITE: SYNTHESIS AND ANTIBACTERIAL ACTIVITY <u>Aleš Panáček</u> , Lucie Hochvaldová, David Panáček, Aris Bakandritsos, Renata Večeřová, Lucie Válková, Tomáš Malina, Jan Belza, and Libor Kvítek | 196 |
| 3Po17 PŘÍPRAVA MEĚNATÝCH KOMPLEXOV S BIOAKTÍVNYMI LIGANDAMI A ICH POTENCIÁLNĚ BIOLOGICKÉ VLASTNOSTI <u>Karin Preinerová</u> , Noémi Molnárová..... | 197 |
| 3Po18 ŠTÚDIUM METALO-ORGANICKÝCH SIETÍ OBSAHUJÍCICH FLUOROVANÉLIGANDY <u>Dávid Princík</u> , Vladimír Zelenák | 197 |

| | |
|---|-----|
| 3Po19 SYNTÉZA NANOMPOZITŮ NANOČÁSTIC STŘÍBRA NANESENÝCH NA OXIDU HLINITÉM <u>Robert Pucek</u> , Aleš Panáček, Libor Kvítek | 198 |
| 3Po20 MULTIVRSTVÉ ANTIBALISTICKÉ CERMETY NA BÁZI TITANU Vlastimil Brožek, Zdeněk Kutílek, Libor Mastný, <u>Ondřej Ruml</u> , Ivo Marek, Filip Průša, Pavel Rohan | 198 |
| 3Po21 POLYMERNÍ NANOSTRUKTURY, JEJICH MODIFIKACE A INTERAKCE S BUŇKAMI <u>P. Slepíčka</u> , J. Siegel, N. Slepíčková Kasálková, O. Lyutakov, Z. Kolská, V. Švorčík | 199 |
| 3Po22 PŘÍPRAVA A VLASTNOSTI SPECIFICKÝCH UHLÍKOVÝCH NANOSTRUKTUR <u>Nikola Slepíčková Kasálková</u> , Petr Slepíčka, Alžběta Turnovská, Václav Švorčík | 199 |
| 3Po23 CRYSTALLOCHEMISTRY OF NI(II) COMPLEXES BASED ON CHELATING NEOCUPROINE LIGAND <u>Richard Smolko</u> , Juraj Černák, Michal Dušek, Juraj Kuchár..... | 200 |
| 3Po24 IMPACT OF ATMOSPHERIC PRESSURE PLASMA TREATMENT ON SURFACE METALLIZATION OF CFRP COMPOSITES L.D. Rafailović, <u>M. Stupavska</u> , V. Prysiazhnyi, G. Polt, O. Rohr, S. Nixon, J. Rahel | 200 |
| 3Po25 REAKCE FLUORIDU VÁPENATÉHO V ELEKTRICKÉM VÝBOJI Libor Mastný, <u>Miroslav Šimek</u> , Martina Kohoutková, Ivo Marek, Vlastimil Brožek | 201 |
| 3Po26 ADVANCES IN THE COORDINATION CHEMISTRY OF NI(II) COMPLEXES WITH AMINOALKYLPYRIDINES AS CHELATING N-DONOR LIGANDS <u>Slavomíra Šterbinská</u> , Juraj Černák, Juraj Kuchár | 201 |
| 3Po27 MECHANISTIC STUDY OF SYNERGISTIC ANTIBACTERIAL EFFECT OF SILVER NANOPARTICLES COMBINED WITH VANCOMYCIN AGAINST <i>E. FAECIUM</i> USING FLUORESCENCE MICROSCOPY <u>Lucie Váľková</u> , Lucie Hochvaldová, Martin Mistrík, Renata Večeřová, Milan Kolář, Libor Kvítek, and Aleš Panáček..... | 202 |
| 3Po28 ODSTRAŇOVANIE ⁶⁰ CO A ⁹⁹ TC Z VODNÝCH ROZTOKOV SORBETMI NA BÁZE UHLÍKA <u>Eva Viglašová</u> , Michal Galamboš, Silvia Vyhnaneková, Martin Daňo, Darina Tóthová | 202 |
| 3Po29 CHEMICKÉ MODIFIKACE POVRCHŮ POLYMERŮ, ROUBOVÁNÍ ČÁSTIC SÍRY A OXIDŮ ŽELEZA NA POVRCHY POLYMERŮ, CHARAKTERIZACE PŘIPRAVENÝCH MATERIÁLŮ <u>Zdeňka Kolská</u> , Simona Lupínková, Monika Benkocká, Václav Švorčík, Petr Sajdl, Martin Orendáč | 203 |
| 3Po30 BIOKOMPATIBILITA MODIFIKOVANÉ BAKTERIÁLNÍ CELULÓZY A. Kutová, L. Staňková, O. Kvítek, Z. Kolská, L. Bačáková, <u>V. Švorčík</u> | 203 |
| 3Po31 SYNTHESIS, CHARACTERIZATION OF CHITOSAN LAYERED DOUBLE HYDROXIDE ION-IMPRINTED POLYMER FOR COPPER ION REMOVAL <u>Vipul Vilas Kusumkar</u> , Eva Viglašová, Michal Galamboš..... | 204 |
| 3Po32 POVRCHOVÉ ÚPRAVY POLYETHYLENNAFTALÁTU ZA VYUŽITÍ BIMETALICKÝCH NANOSTRUKTUR <u>Jana Pryjmaková</u> , Markéta Kaimlová, Barbora Vokatá, Tomáš Hubáček, Petr Slepíčka, Václav Švorčík, Jakub Siegel | 204 |

Postery - sekcia 4 Organická chémia..... 206

- 4Po01 SYNTÉZA A REAKTIVITA RÔZNE SUBSTITUOVANÝCH [3]DENDRALÉNOV
Rastislav Antal, Zbyněk Brůža, Ondřej Kratochvíl, Milan Pour.....206
- 4Po02 DEHALOGENACE V PŘÍTOMNOSTI AKRYLAMIDOVÉ SKUPINY: PŘEKVAPIVÁ
 REAKTIVITA DVOJNÉ VAZBY PŘI KATALYTICKÉ TRITIO-DEJODACI
Břetislav Brož, Reik Löser, Aleš Marek206
- 4Po03 HORMOPRIMING TO MITIGATE ABIOTIC STRESS EFFECTS: A CASE STUDY
 OF N9-SUBSTITUTED CYTOKININ DERIVATIVES WITH A FLUORINATED
 CARBOHYDRATE MOIETY
Magdaléna Bryksová, Andrea Hybenová, Alba E. Hernandez, Ondřej Novák, Aleš Pěněčík, Lukáš
 Spíchal, Nuria de Diego and Karel Doležal207
- 4Po04 THE SYNTHESIS OF AMIDES AND ESTERS BY PD⁰-CATALYZED CARBONYLATIVE
 C(sp³)-H ACTIVATION WITH [1,4]-PD SHIFT
Tomáš Čarný, Ronan Rocaboy, Antonin Clemenceau, Olivier Baudoin207
- 4Po05 SYNTHESIS OF RACEMIC PYRROLIDINE ALKALOID CODONOPSINOL B FOR CELL
 PROLIFERATION ASSAYS
Lukáš Ďurina, Anna Ďurinová, Ján Moncol, Róbert Fischer208
- 4Po06 SYNTÉZA FUNKCIONALIZOVANÝCH SPIRO[AKRIDIN-9-YL]-TIOMOČOVÍN
 S METYL-BRÓMACETÁTOM A DIETYL-ACETYLÉNDIKARBOXYLÁTOM
Monika Garberová, Mária Vilková, Ivan Potočný, Ján Imrich209
- 4Po07 THIOPHENE-LINKED PHTHALOCYANINES AND SUBPHTHALOCYANINES
 DIRECTLY ON THEIR NUCLEUS.
Mgr. Marcela Gašparová, RNDr. Zita Tokárová, PhD., RNDr. Kamil Tokár, PhD.209
- 4Po08 DOMINO CARBONYLATION REACTION IN THE SYNTHESIS OF NITROGEN
 HETEROCYCLES
Michal Gavenda, Tomáš Vyskočil, Martin Markovič, Peter Kooš, Tibor Gracza210
- 4Po09 THE FIRST TOTAL SYNTHESIS AND ABSOLUTE CONFIGURATION ASSIGNMENT OF
 HETEROCORNOL D
Ján Gettler, Tomáš Čarný, Martin Markovič, Peter Kooš, Tibor Gracza.....211
- 4Po10 THERMAL STABILITY OF PYRIDINE HYDRAZONE PHOTOSWITCHES
Lea Hegedúsová, Bernard Mravec, Juraj Filo, Marek Cigán211
- 4Po11 NOVEL HAMAMELITANNIN ANALOGUES: ANTIOXIDANT AND ANTI-BIOFILM
 ACTIVITY
 Jana Hricovíniová, Šárka Pospíšilová, Josef Jampílek and Zuzana Hricovíniová212
- 4Po12 VIDITEĽNÝM SVETLOM INICIOVANÝ KROS-KAPLING KATRITZKÉHO SOLÍ A
 NITROSTYRÉNOV
 Michaela Marčeková, Branislav Ferko, Katarína Ráchel Detková, Dušan Berkeš a Pavol Jakubec.....212
- 4Po13 SYNTHESIS, SOLUBILITY INCREASE AND BIOLOGICAL ACTIVITY OF PURINE
 DERIVATIVES FOR BIOTECHNOLOGICAL APPLICATION
Dardan Klos, Lucie Plíhalová, Marel Zatloukal, Karel Doležal213

| | |
|--|-----|
| 4Po14 SYNTHESIS OF NON-SYMMETRICAL MONOQUATERNARY AMMONIUM SALTS AS POTENTIAL REACTIVATORS OF INHIBITED CHOLINESTERASES <u>Zuzana Kohoutova</u> , David Malinak, Tereza Hofmanova, Rudolf Andrys, Jana Svobodova, Kamil Musilek | 213 |
| 4Po15 UNIVERSAL STRATEGY FOR THE POLYKETIDE SYNTHESIS. TOTAL SYNTHESIS OF AGROPYRENOL, SORDARIAL, AND HETEROCORNOL A AND B Martin Markovič, <u>Peter Kooš</u> , Saskia Sokoliová, Nikola Boháčiková, Tomáš Vyskočil, Ján Moncol' and Tibor Gracza | 214 |
| 4Po16 SYNTÉZA A HODNOCENÍ ANALOG <i>N</i> -[3,5-BIS(TRIFLUORMETHYL)FENYL]-5-BROM-2-HYDROXYBENZAMIDU ÚČINNÝCH PROTI METHICILIN-REZISTENTNÍM STAFYLOKOKŮM <u>Martin Krátký</u> , Karolína Dlasková Jaklová, Klára Konečná, Jana Maixnerová, Jarmila Vinšová..... | 214 |
| 4Po17 ORGANOKATALYTICKÁ DOMINO MANNICHOVA REAKCIA/ FLUORÁCIA V PODMIENKACH MECHANICKEJ AKTIVÁCIE V GUĽOVOM MLYNE <u>Dominika Krištofiková</u> , Mária Mečiarová, Radovan Šebesta | 215 |
| 4Po18 CRYSTAL STRUCTURE OF METHYL (<i>Z</i>)-2-NITRO-3-(PHENYLAMINO)ACRYLATE (1) AND (<i>E</i>)-3-OXO-2-((PHENYLAMINO)METHYLENE)BUTANENITRILE (2) <u>Ján Lokaj</u> , Viktor Milata, Ján Moncol', Branislav Pavilek | 215 |
| 4Po19 ACCELERATING CO GAS-FREE CARBONYLATION OF ARYL BROMIDES IN CONTINUOUS FLOW SYSTEM <u>Pavol Lopatka</u> , Martin Markovič, Peter Kooš, Tibor Gracza..... | 216 |
| 4Po20 IZOLÁCIA CYKLOFÁNOV Z PEČEŇOVKY <i>MARCHANTIA POLYMORPHA</i> <u>Miloš Lukáč</u> , Mário Markuliak, Branislav Horváth..... | 217 |
| 4Po21 IMIDAZO[1,2- <i>C</i>]PYRIMIDIN-5(6H)-ONE INHIBITORS OF CDK2: SYNTHESIS, KINASE INHIBITION AND CO-CRYSTAL STRUCTURE Josef Jansa, Radek Jorda, Jana Škerlová, Petr Pachel, Miroslav Peřina, Eva Řezníčková, Tomáš Heger, Tomáš Gucký, Pavlína Řezáčová, <u>Antonín Lyčka</u> , Vladimír Kryštof | 217 |
| 4Po22 SYNTHESIS OF NOVEL ANTIBIOTIC ANALOGUES DERIVED FROM BERKELEYLACTONE A <u>Tomáš Malatinský</u> , Dominika Valachová, David Scherhauser, Oľga Caletková, Dušan Berkeš, Petra Olejníková, Pavol Jakubec | 218 |
| 4Po23 SYNTHESIS OF SELECTED AMINOPHENOLIC CONJUGATES FOR THE PURPOSES OF RESEARCHING THEIR TOXICITY <u>David Malinak</u> , Tomas Rousar, Petr Cesla, Jana Váňová, Nicola Cmuntova, Rudolf Andrys, Kamil Musilek | 218 |
| 4Po24 THE SYNTHESIS OF PYRROLOPHENANTHRIDIN-7-ONE ALKALOIDS BY TANDEM PD ⁰ -CATALYZED AMINOCARBONYLATION AND C(SP ²)-H ACTIVATION Tomáš Čarný, <u>Martin Markovič</u> , Peter Kooš, Tibor Gracza | 219 |
| 4Po25 PRÍPRAVA IZOPEROTETÍNU A <u>Mário Markuliak</u> , Miloš Lukáč, Branislav Horváth..... | 220 |

| | |
|--|-----|
| 4Po26 SYNTHESIS OF NEW TETRAFLUOROTEREPHTALONITRILE DERIVATIVES AS POTENTIAL BIOLOGICALLY ACTIVE COMPOUNDS AND NOVEL OPTO-ELECTRONIC MATERIALS Daniel Végh, Branislav Pavílek, Dušan Bortňák and <u>Viktor Milata</u> | 220 |
| 4Po27 ENANTIOSELEKTÍVNA SYNTÉZA 3,4-DIHYDROPYRÁNOV CYKLOADIČNOU REAKCIOU <u>Viktória Modrocká</u> , Mária Mečiarová, Radovan Šebesta | 221 |
| 4Po28 PHOTOCHEMISTRY OF PYRIDINE/QUINOLINE HYDRAZONE PHOTOSWITCHES <u>Bernard Mravec</u> , Juraj Filo, Marek Cigáň..... | 221 |
| 4Po29 ASYMETRICKÁ TANDEMOVÁ KONJUGOVANÁ ADÍCIA GRIGNADOVÝCH ČINIDIEL NA HETEROCYKLICKÉ MICHAELOVE AKCEPTORY A REAKCIA S ELEKTROFILMI <u>Brigita Mudráková</u> , Radovan Šebesta..... | 222 |
| 4Po30 SYNTHESIS OF 5-PHENYLAZOPYRIMIDINES AND THEIR PHOTOCHEMICAL PROPERTIES <u>Lucie Mužíková Čechová</u> , Juraj Filo, Martin Dračinský, Zlatko Janeba, Marek Cigáň, Eliška Procházková..... | 222 |
| 4Po31 PRIAMA JODÁCIA BENZOTIAZOLOV – RÝCHLY PRÍSTUP KU KVADRUPOLÁRNÝM FLUOROFOROM S VYSOKOU DVOJFOTÓNOVOU ABSORPCIOU <u>Jela Nociarová</u> , Patrik Osuský, Erik Rakovský, Dimitris Georgiou, Ioannis Polyzos, Mihalis Fakis, Peter Hrobárik..... | 223 |
| 4Po32 STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA NOVÝCH IZOMÉRNÝCH AZA-ANALÓGOV PRÍRODNÉHO JASPÍNU B <u>Michaela Novotná</u> , Miroslava Martinková, Jana Špaková Raschmanová | 223 |
| 4Po33 OXIDATIVE C-H HOMOCOUPILING OF PUSH-PULL BENZOTHIAZOLES: AN ATOM-ECONOMICAL ROUTE TO HIGHLY EMISSIVE QUADRUPOLAR ARYLAMINE-FUNCTIONALIZED 2,2'-BIBENZOTHIAZOLES WITH ENHANCED TWO-PHOTON ABSORPTION <u>Patrik Osuský</u> , Jela Nociarová, Maroš Smolíček, Róbert Gyepes, Dimitris Georgiou, Ioannis Polyzos, Mihalis Fakis, and Peter Hrobárik | 224 |
| 4Po34 SURFACE MODIFICATION VIA SURFACE INITIATED PHOTO ATRP. <u>Darshak Pathiwada</u> , Jaroslav Mosnáček | 225 |
| 4Po35 TRI-SUBSTITUOVANÉ PUSH-PULL NITROALKÉNY V SYNTÉZE HETEROCYKLOV <u>Branislav Pavílek</u> , Dušan Bortňák, Daniel Végh, Viktor Milata..... | 225 |
| 4Po36 STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA SPIROCYKLICKÝCH OXINDOLOV KATALYZOVANÁ CHIRÁLNYMI BIFUNKČNÝMI SKVARAMIDMI <u>Tibor Peňaška</u> , Vitalii Palchykov, Radovan Šebesta | 226 |
| 4Po37 2,5-DISUBSTITUOVANÉ 1,3,4-OXADIAZOLY JAKO VYSOCE ÚČINNÁ POTENCIÁLNÍ ANTITUBERKULOTIKA <u>Václav Pflégr</u> , Martin Krátký, Jarmila Vinšová..... | 226 |

| | | |
|-------|--|-----|
| 4Po38 | EFEKTÍVNA PRÍPRAVA (2 <i>S</i> ,4 <i>S</i>)-4HYDROXYGLUTAMÍNU. FORMÁLNA SYNTÉZA HEMEROCALLISAMÍNU I <u>Lucia Pinčeková</u> , Eva Jančiová, Dušan Berkeš, Oľga Caletková | 227 |
| 4Po39 | ANTISENESCENT N9-SUBSTITUTED PURINE BASED CYTOKININS AND THEIR APPLICATIONS IN BIOTECHNOLOGIES <u>Lucie Plíhalová</u> , Karel Doležal, Marek Zatloukal..... | 228 |
| 4Po40 | STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA CYTOTOXICKÝCH PYROLIDÍNOVÝCH ALKALOIDOV: NOVÉ ANALÓGY PRÍRODNÝCH BROUSSONETÍNOV <u>Tatiana Pončáková</u> , Dominika Fabiánová, Miroslava Martinková, Martin Fabián, Milica Fabišíková, Martina Bago Pilátová, Alexandra Macejová | 228 |
| 4Po41 | SYNTHESIS OF BODIPY LABELED BISQUATERNARY AMMONIUM SALTS USED AS REACTIVATORS OF INIBITED ACETYLCHOLINESTERASE <u>Eliska Prchalova</u> , David Malinak, Jana Svobodova, Lukas Fresser, Rudolf Andrys, Zbynek Heger, Kamil Musilek | 229 |
| 4Po42 | SYNTHESIS OF STATTIC-CARBOXAMIDES AS POTENTIAL STAT3 INHIBITORS <u>Miroslav Psotka</u> , David Malinak, Rudolf Andrys, Jana Svobodova, Kamil Musilek, Milan Reinis..... | 229 |
| 4Po43 | SYNTÉZA BENZOTIAZOLOVÝCH ANALÓGOV BODIPY FARBÍV S KVADRUPOLÁRNOU D-II-A-II-D ŠTRUKTÚROU PRE BIOIMAGING <u>Maroš Smolíček</u> , Jela Nociarová, Peter Hrobárik | 230 |
| 4Po44 | VYUŽITIE CHINÍNU A MECHANICKEJ AKTIVÁCIE V ASYMETRICKEJ DIENOLÁTOVEJ OXA-DIELSOVEJ-ALDEROVEJ REAKCII S OBRÁTENÝMI ELEKTRÓNOVÝMI POŽIADAVKAMI <u>Klára Stankovianska</u> , Tibor Peňaška, Radovan Šebesta | 230 |
| 4Po45 | ŠTÚDIUM ORGANOKATALYTICKEJ TROJKOMPONENTNEJ KNOEVENAGELOVEJ/DIELSOVEJ-ALDEROVEJ REAKCIE <u>Henrich Szabados</u> , Eva Veverková, Radovan Šebesta..... | 231 |
| 4Po46 | N-PHENYLPUTRESCINE AND ITS DERIVATIVES: PREPARATION AND BIOCATALYTIC APPLICATION AS NATURAL PRODUCT INSPIRED AMINE DONORS <u>Mária Štiblariková</u> , Catherine A. McKenna, Irene De Silvestro, Dominic J. Campopiano, Andrew L. Lawrence..... | 231 |
| 4Po47 | PREPARATION OF <i>E</i> ISOMERS OF HYDRAZONES AND ANIL-LIKE COMPOUNDS BY THERMALLY STIMULATED ISOMERIZATION OF <i>Z</i> ISOMERS OF ANIONS <u>Pavol Tisovský</u> , Jana Donovalová, Anton Gáplovský | 232 |
| 4Po48 | NEW CARBOHYDRATE-DERIVED ORGANOCATALYST FOR ASYMMETRIC MICHAEL REACTION <u>Monika Tvrdoňová</u> , Róbert Rončák, Jozef Gonda..... | 232 |
| 4Po49 | SYNTÉZA ANTIBIOTÍK S DUÁLNYM ÚČINKOM <u>Dominika Valachová</u> , Pavol Jakubec, Tomáš Malatinský | 233 |
| 4Po50 | SULFONAMID-SALICYLALDEHYDOVÉ IMINY ÚČINNÉ PROTI STAFYLOKOKŮM REZISTENTNÍM NA METHICILIN A TRIMETHOPRIM Martin Krátký, Klára Konečná, Ondřej Jand'ourek, Jana Maixnerová, <u>Jarmila Vinšová</u> | 233 |

| | |
|---|-----|
| 4Po51 SYNTÉZA SÍRNEHO BIOIZOSTÉRU OSELTAMIVIRU <u>Barbora Zahradníková</u> , Viktória Modrocká, Mária Mečiarová, Radovan Šebesta | 234 |
| 4Po52 SYNTHESIS AND BIOLOGICAL ACTIVITY OF NOVEL N ⁶ -SUBSTITUTED PURINE 2'-DEOXY-9(B)-D-RIBOSIDES <u>M. Zatloukal</u> , V. Matušková , J. Voller , J.Grúz , K. Doležal , and M. Strnad | 234 |
| 4Po53 SYNTHETIC ROUTE TO NOVEL POLYHYDROXYLATED PYRROLIDINE AND INDOLIZIDINE ALKALOIDS <u>Ján Elečko</u> , Jozef Gonda | 235 |

Postery - sekcia 5 Vyučovanie a história chémie 236

| | |
|--|-----|
| 5Po01 VIDEODATABÁZE ŠKOLNÍCH CHEMICKÝCH POKUSŮ – BEDOX <u>Martin Bílek</u> , Kateřina Chroustová, Martin Rusek, Pavel Beneš, Petr Adolf Skřehot, Zdeněk Hon, Michaela Melicharová..... | 236 |
| 5Po02 SBÍRKY VZOROVÝCH KOMPLEXŮ VYUŽITELNÉ VE VÝUCE CHEMIE KOORDINAČNÍCH SLOUČENIN <u>Bohuslav Drahoš</u> , Radim Masař | 236 |
| 5Po03 REAKCE ANILINU A JEHO DERIVÁTŮ S KYSELINOU MRAVENČÍ BEZ ROZPOUŠTĚDLA V PŘÍTOMNOSTI MIKROVLN JAKO VÝUKOVÝ EXPERIMENT - VLIV SUBSTITUENTU V MOLEKULE ANILINU Michael Mycak, <u>Karel Kolář</u> , Martin Bílek | 237 |
| 5Po04 PRAKTICKÉ VYUŽITÍ ONLINE NÁSTROJŮ VE VÝUCE CHEMIE <u>Michal Lach</u> , Kateřina Trčková | 237 |
| 5Po05 MOBILNÍ A WEBOVÁ APLIKACE EMIL NEJEN PRO STUDENTY NA VŠCHT <u>Tomáš Mládek</u> , Ondřej Ruml..... | 237 |

Postery - sekcia 6 Aplikovaná chémia, životné prostredie a polyméry 239

| | |
|---|-----|
| 6Po01 TRANSCRIPTOMIC AND PROTEOMIC ANALYSIS OF DROUGHT STRESS RESPONSE IN FIRST WEEKS OF GERMINATION OF OPIUM POPPY PLANTS Kristýna Kundráťová, <u>Martin Bartas</u> , Petr Pečinka, Ondřej Hejna, Vladislav Čurn, Jiří Červeň | 239 |
| 6Po02 ADSORPCE ANTIBIOTIK Z VODNÉHO PROSTŘEDÍ NA AKTIVNÍ UHLÍ NA BÁZI BIOMASY <u>Jan Bednárek</u> , Ivan Koutník, Lenka Matějová, Gerardo Juan Francisco Cruz..... | 239 |
| 6Po03 INTERAKCE EUROPIA S CEMENTOVÝMI MATERIÁLY V PŘÍTOMNOSTI ORGANICKÝCH LÁTEK <u>Marta Burešová</u> , Barbora Drtinová, Jana Kittnerová | 240 |
| 6Po04 ROLE REFRAKTIVNÍHO UHLÍKU V ADSORPČNÍCH VLASTNOSTECH PŮD František Bůzek, <u>Bohuslava Čejková</u> , Ivana Jačková a Barbora Doušová | 240 |
| 6Po05 NANOPARTICLE POWDERS OBTAINED BY DIFFERENT DRYING TECHNIQUES <u>Kahynna C. Loureiro</u> , Alessandro Jager, Eliezer Jager, Martin Hruby | 240 |

| | |
|--|-----|
| 6Po06 POLY(2-METHYL-2-OXAZOLINE)- <i>B</i> -POLY[2-(DIISOPROPYLAMINO)ETHYL METHACRYLATE] BASED NANOPLATFOM FOR BIOMEDICAL APPLICATIONS <u>Peter Černoč</u> , Alessandro Jager, Zulfiya Černočová, Vladimír Sincari, Lindomar J. C. Albuquerque, Rafal Konefal, Ewa Pavlova, Fernando C. Giacomelli, Eliezer Jager | 241 |
| 6Po07 ISOLATION AND CHARACTERIZATION OF <i>FUSARIUM SOLANI</i> : A NOVEL BISPHENOL A DEGRADING FUNGUS <u>Jiri Cerven</u> , Zuzana Rybkova, Katerina Malachova..... | 242 |
| 6Po08 SCREENING OF COMMERCIAL ALCOHOL DEHYDROGENASES FOR BIOTRANSFORMATION OF ACETOPHENONE TO S-1-PHENYLETHANOL <u>Hana Dobiašová</u> , Patrícia Zuskáčová, Alžbeta Chochulová | 242 |
| 6Po09 PŮDNÍ INDIKÁTORY ZNEČIŠTĚNÍ ANTIMONEM V MÍSTECH DOPRAVNÍCH UZLŮ <u>Barbora Doušová</u> , Miloslav Lhotka, František Bůzek, Bohuslava Čejková, Iva Jačková, Eva Bedrnová..... | 243 |
| 6Po10 ODSTRAŇOVANIE CHLÓRBENZÉNU POMOCO UHLIA A ŽELEZANU <u>Lucia Fašková</u> , Daniela Pavúková, Ladislav Štibrányi, Ján Híveš | 243 |
| 6Po11 APPLICATION OF PHOTOCHEMICALLY ACTIVE COMPOUNDS AS INITIATORS FOR PHOTO-ATRP <u>Mária Gurská</u> , Anita Andicsová-Eckstein, and Jaroslav Mosnáček..... | 244 |
| 6Po12 MULTI-STIMULI-RESPONSIVE FERROCENE-BASED MICELLES FOR SOLID TUMOR THERAPY BY EPR EFFECT <u>S. Hoang</u> , E. Gravel, M. Hruby, E. Doris..... | 244 |
| 6Po13 SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF SELF-HEALABLE, REPROCESSABLE AND RECYCLABLE BIO-BASED POLYESTER NETWORKS <u>Islam Ismael</u> , Martin Danko..... | 245 |
| 6Po14 THE POSSIBILITIES OF HYDRODEBROMATION OF PESTICIDE BROMOXYNIL IN AQUEOUS SOLUTION BY COPPER-BASED MATERIALS <u>Barbora Kamenická</u> , Tomáš Weidlich | 245 |
| 6Po15 ADSORPCIA IÓNOV MEDI POMOCO DÚŠKY MATERINEJ (<i>THYMUS SERPYLLUM</i> L.) <u>Mária Kováčová</u> , Halyna Yankovych, Mariano Casas-Luna, Michaela Remešová, Lenka Findoráková, Martin Stahorský, Ladislav Čelko, Matej Baláž | 246 |
| 6Po16 STRUVIT - PREVÁDZKOVÝ PROBLÉM ČOV, ALE I DÔLEŽITÝ ZDROJ FOSFORU <u>Bibiána Kožárová</u> , Zuzana Imreová, Klára Paganová..... | 246 |
| 6Po17 VOLNOOBJEMOVÉ A ABSOPČNÉ VLASTNOSTI VODY V POLYMÉROCH NA BÁZE EPOXIDOVANÝCH RASTLINNÝCH OLEJOV SKÚMANÉ POZITRÓNOVOU ANIHILÁCIOU <u>David Pavel Královič</u> , Ondrej Šauša..... | 247 |
| 6Po18 DYE REMOVAL FROM AQUEOUS SOLUTIONS BY NANOFILTRATION <u>Olga Krupková</u> , Jiří Cuhorka, Libor Dušek | 247 |
| 6Po19 THE ROLE OF DYE'S STRUCTURE ON THE DEGRADATION RATE DURING INDIRECT ANODIC OXIDATION <u>Gabriela Kuchtová</u> , Libor Dušek | 248 |

| | | |
|-------|---|--|
| 6Po20 | OPTIMALIZÁCIA ŠTRUKTURÁLNEJ ANALÝZY APOLIPOPOTEÍNU CIII POMOCOU HMOTNOSTNEJ SPEKTROMETRIE <u>Filip Květoň</u> , Zuzana Pakanová, Marek Nemčovič, Lucia Poliaková, Anna Šalingová, Peter Baráth ..248 | |
| 6Po21 | ROS-AKTIVOVATELNÁ PROLÉČIVA ZALOŽENÁ NA FERROCENYLIMINOBORONÁTECHAZAŘÍZENÍ PRO TESTOVÁNÍ ELEKTROCHEMICKY AKTIVOVATELNÝCH PROLÉČIV <u>Karel Lacina</u> , Jakub Věžník, Martin Konheřt, Zdenka Fohlerová249 | |
| 6Po22 | SORPCE TOXICKÝCH OXYANIONTŮ NA MODIFIKOVANÉ KAOLÍNY <u>Miloslav Lhotka</u> , Barbora Doušová249 | |
| 6Po23 | SPRI: NOVÁ METODA PRO ZJIŠŤOVÁNÍ PERMEABILIT ROSTLINNÝCH MEMBRÁN <u>Dominika Marková</u>250 | |
| 6Po24 | CYTOTOXICITA UPKONVERZNÍCH NANOČÁSTIC <u>Petr Matouš</u> , Dana Mareková, Lucia Machová, Magdalena Vosmanská, Pavla Jendelová, Daniel Horák, Vít Herynek, Olexandr Shapoval, Mykhailo Nahorniak250 | |
| 6Po25 | COMPARATIVE STUDY OF PRIMARY DRIERS IN OXIDATIVE DRYING PAINTS: MANGANESE(III) ACETYLACETONATE AND COBALT(II) 2-ETHYLHEXANOATE <u>Eliška Matušková</u> , Jan Honzík, Jaromír Vinklárek251 | |
| 6Po26 | MOLECULAR IMAGING BY NEWLY DEVELOPED TIMEPIX3 DETECTOR <u>Adam Modrý</u> , Eliška Trojanová, Jan Jakubek, Viktor Sýkora, Jiří Dammer, Luděk Šefc251 | |
| 6Po27 | WATER MATRIX LIMITATIONS FOR REMOVAL OF REACTIVE AZO DYE FROM DYEING WASTEWATERS USING THE PHOTOCATALYTIC PROCESS <u>Jiří Palarčík</u> , Marek Smolný, Jiří Cakl252 | |
| 6Po28 | BIOCOMPATIBILITY, BIODISTRIBUTION AND SOLUTION-DEPENDENT CLOUD POINT TEMPERATURE OF FOUR THERMORESPONSIVE POLYACRYLAMIDES Ondřej Groborz, Kristýna Kolouchová, <u>Jan Pankrác</u> , Peter Keša, Tereza Krunclová, Aneta Pierzynová, Jan Kadlec, Mária Hovořáková, Jaromír Šrámek, Tomáš Kučera, Pavel Švec, Martin Hrubý, Richard Hoogenboom, Petr Štěpánek252 | |
| 6Po29 | VODOROZPUSTNÁ POLYMERNÍ KANCEROSTATIKA S ENZYMŮV ŠTĚPITELNÝMI VAZBAMI: PROTINÁDOROVÁ ÚČINNOST IN VIVO <u>Michal Pechar</u> , Robert Pola, Lenka Horáková, Aneta Dydowiczová, Marcela Filipová, Jun Fang, Tomáš Etrych, Richard Laga253 | |
| 6Po30 | PREDIKCE BIOLOGICKÉ DOSTUPNOSTI RTUTI VE VODNÍCH EKOSYSTÉMECH POMOCÍ TECHNIKY DIFÚZNÍHO GRADIENTU V TENKÉM FILMU <u>Pavčina Pelcová</u> , Andrea Ridošková, Radovan Kopp, Jan Grmela, Ondřej Malý, Helena Absolínová, Marie Hružová253 | |
| 6Po31 | HODNOCENÍ TOXICKÉHO VLIVU BROWNFIELDŮ V MORAVSKOSLEZSKÉM KRAJI NA ŽIVOTNÍ PROSTŘEDÍ Hana Kolářová, <u>Hana Sezimová</u> , Martin Mucha, Ivan Urban254 | |
| 6Po32 | SEPARATION AND DETERMINATION OF ²²⁶ Ra USING MODIFIED SORBENT FORM FLY ASH <u>Veronika Silliková</u> , Silvia Dulanská, Miroslav Boča Zuzana Netriová, Blanka Kubíková255 | |

- 6Po33 UHLÍKOVÉ KVANTOVÉ BODKY PRIPRAVENÉ Z KYSELINY CITRÓNOVEJ A ICH POTENCIÁLNE VYUŽITIE V PRAXI
Lucia Lowenbergová, Eva Boldišová, Eva Špitalská255
- 6Po34 SECONDARY METABOLITES, SCREENING OF PHYTOCHEMICALS IN *FAGUS*, *QUERCUS* AND *BETULA* SPECIES AND THEIR ANTIVIRAL PROPERTIES
Igor Šurina, Martina Bednářová, Michal Jablonský, Radko Tiňo, Aleš Ház256
- Corresponding author:** Ing. Igor Šurina, PhD., Igor.Surina@stuba.sk256
- 6Po35 INHIBÍCIA AKTIVITY ČISTIARENSKÉHO KALU ANTIBIOTIKAMI
Dóra Varjúová, Petra Szabová, Igor Bodík256

Postery - sekcia 7 Chemprogress – chemické technológie 257

- 7Po01 VPLYV ŽELEZANOV A ZEOLITOV PRI ODSTRAŇOVANÍ KARBAMAZEPÍNU A KOFEÍNU Z ROZTOKOV
Michaela Benkőová, Ján Híveš, Emília Mališová, Andrea Červenková257
- 7Po02 MOŽNOSTI ZVYŠOVANIA STABILITY ELEKTROCHEMICKY PRIPRAVOVANÝCH ŽELEZANOV POMOCOU KAPSULÁCIE SO ZEOLITMI
Andrea Červenková, Ján Híveš, Emília Mališová, Michaela Benkőová257
- 7Po3 CHARACTERIZATION OF HYDROTALCITES SUITABLE FOR DEACIDIFICATION OF CELLULOSIC MATERIALS
Jana Jurišová, Vladimír Danielik, Marta Ambrová, Milan Králik, Katarína Vizárová258
- 7Po04 MODIFICATION OF SELECTED SPECIES OF WOOD BY ATMOSPHERIC PLASMA
Peter Jurkovič, Igor Novák, Ján Matyašovský, Peter Duchovič, Angela Kleinová, Matej Mičušík258
- 7Po05 μ -RAMANOVA SPEKTROSKOPIA NA CHARAKTERIZÁCIU KORÓZNYCH VRSTIEV ŽELEZNÝCH PREDMETOV
Roman Košťúr, Matilda Zemanová259
- 7Po06 HYBRID WELDING OF DUPLEX STEELS FOR CHEMICAL REACTORS
Jaroslav Bruncko , Miroslav Michalka , Michal Simek , Andrej Vincze , Rastislav Ormandy , Tomas Szewczyk259
- 7Po07 „ZELENÉ“ KOMPOZÍCIE VÝBUŠNÍN
Milan Olšovský, Milan Krištof, Petr Kuna259
- 7Po8 STUDIUM VLIVU REAKČNÍCH PODMÍNEK NA KONVERZNÍ REAKCI SÍRANU ŽELEZNATÉHO S HYDROXIDEM HOŘEČNATÝM
Kateřina Bednářová, Jan Vídenský, Ivona Sedlářová, Martin Zlámal260
- 7Po09 KERATIN MODIFIED BY THERMAL HEATING AS A SCAVENGER OF FORMALDEHYDE
Ján Matyašovský Peter Jurkovič, Peter Duchovič, Igor Novák260

Autorský index 262

PLENÁRNA PREDNÁŠKA

VÝVOJ KVANTITATÍVNYCH A MULTIPLEXNÝCH DIAGNOSTICKÝCH TECHNOLOGIÍ A APLIKÁCIÍ

Pavol Čekan¹, Monika Radvánska¹, Adrián Szobi¹, Evan Paul¹

¹MultiplexDX s.r.o., Ilkovičova 8, 841 04 Bratislava, pavol@multiplexdx.com

Ribonukleové kyseliny (RNA) sú kvôli ich kritickej úlohe v regulácii rôznych bunkových procesov považované za účinné a minimálne invazívne biomarkery pre diagnostiku chorôb, napríklad rakoviny. Obzvlášť zaujímavými a významnými podskupinami RNA sú krátke mikroRNA (miRNA), ktoré sa v posledných desaťročiach ukázali ako dôležité diagnostické biomarkery pre včasnú a presnú diagnostiku rakoviny kvôli ich vysokej „cell-type“ špecificite a abundancii v ľudských bunkách a tkanivách.

Rozhodli sme sa vyvinúť multiplexnú metódu na vizualizáciu a kvantifikáciu miRNA v ľudských rakovinových tkanivách [1]. Ide o metódu, ktorá kombinuje RNA sekvenačnú a RNA vizualizačnú technológiu. Obe technológie sme vylepšili, aby dokázali lepšie a špecifickejšie kvantifikovať miRNA. V predklinickej validácii našej inovatívnej metódy na dvoch rôznych subtypoch rakoviny kože - bazocelulárnom karcinóme (BCC) a karcinóme z Merkelových buniek (MCC), sme objavili, že dve miRNA - miRNA-205 a miRNA-375, sú vysoko špecifické pre jeden z týchto subtypov rakoviny kože; miRNA-205 je špecifická pre BCC a miRNA-375 je špecifická pre MCC [1]. Vznikla nová multiplexná diagnostika, ktorá na základe detekcie a kvantifikácie dvoch miRNA, dokáže rozlíšiť tieto subtypy rakoviny kože, ktoré sú v skorých štádiách veľmi ťažko rozoznatelné. Umožňuje teda včasnú a presnú diagnostiku a zachytenie MCC, ktorý sa skoro stáva

metastatický a aj preto je jeho smrtnosť vysoká.

Multiplex
DX

MULTIPLEX8+

A highly accurate
breast cancer diagnostic test
for effective personalized treatment
and assessment of therapy response



S využitím invencií z diagnostiky miRNA, sme pokračovali aj vo vývoji multiplexnej kvantitatívnej diagnostickej metódy Multiplex8+, určenej pre onkologických pacientov s rakovinou prsníka. V tomto prípade sme vyvinuli metódu, ktorá dokáže detegovať až 8 RNA biomarkerov v jednom patientskom tkanive. Multiplex8+ opätovne kombinuje RNA sekvenačnú a RNA vizualizačnú technológiu. Jej zámerom je zlepšiť a spresniť diagnostiku rakoviny prsníka, aby diagnostické výsledky mohli byť použité na úspešnú, efektívnu a personalizovanú liečbu pacientov. Na retrospektívnu klinickú validáciu sme získali prestížny EIC Accelerator grant od EK z Bruselu v hodnote 2,5 milióna EUR.



V roku 2020 nás zasiahla pandémia a boj s novým koronavírusom. Keďže naša firma MultiplexDX mala v tom čase možnosti výroby syntetických a modifikovaných oligonukletidov, ktoré sú v podobe primerov a prób základom RT-qPCR testov pre detekciu RNA vírusov, tak sme sa logicky preorientovali na vývoj, validáciu a výrobu RT-qPCR testov na diagnostiku COVID-19. Do dnešného dňa sme vyvinuli 10 RT-qPCR testov, vrátane testu na rozlíšenie COVID-19 a chrípky, ako aj inovatívne, rýchle a mobilné LAMP testy [2]. V rámci RT-qPCR a LAMP testov sme použili niekoľko dôležitých inovácií pre zvýšenie špecificity a senzitivity testov [3],

ktoré sú dnes používané rutinne v certifikovaných diagnostických laboratóriách na Slovensku a v zahraničí.

Ďakujeme BMC SAV, špeciálne tímu Dr. Borisa Klempu, za spoluprácu pri klinickej validácii všetkých RT-PCR a LAMP testov.

- [1] Renwick, M., Cekan, P., et al.: *J Clin Invest.* 123(6), 2694 (2013).
 [2] www.multiplexdx.com
 [3] Borsova, K., Paul, E., Kovacova, V., Radvanska, M., et al.: *Sci. Rep.* (2021), in press.

POZVANÉ PREDNÁŠKY

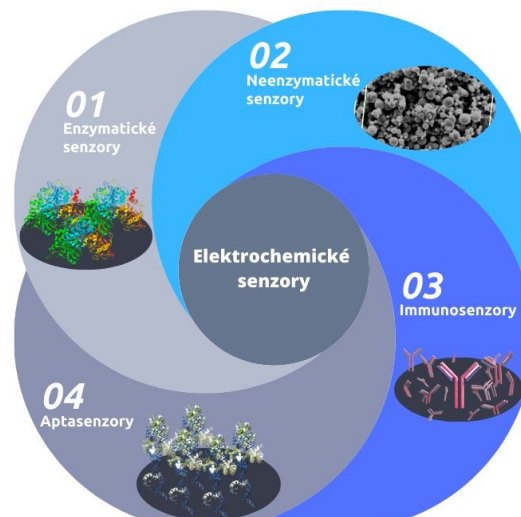
PP1 ELEKTROCHEMICKÉ BIOSENZORY - MODERNÝ A EFEKTÍVNY SPÔSOB DIAGNOSTIKY OCHORENÍ

Renáta Oriňaková¹, Jana Shepa¹, Ivana Šišoláková¹

¹Katedra fyzikálnej chémie, Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta Univerzity Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11, 040 01 Košice, renata.orinakova@upjs.sk

Biosenzory sú v súčasnosti neoceniteľným nástrojom na analýzu vzoriek a to predovšetkým v medicíne, farmakológii, klinickej biochémií, biotechnologických a chemických procesoch, v analýze životného prostredia a potravinárstve. Aplikácie biosenzorov sa rapídne rozširujú v dôsledku rastúcich požiadaviek na rýchlu a presnú kontrolu kvality či kvantitu a detekciu veľmi nízkych koncentrácií látok.

Elektrochemické biosenzory patria k najstarším a najrozšírenejším katalytickým senzoričným zariadeniam a sú založené na tom, že prevádzajú biochemické procesy, ako napr. reakciu medzi enzýmom a substrátom alebo interakciu antigén-protilátka, na elektrické signály. Najbežnejšie elektrochemické senzory sú enzymatické senzory, neenzymatické senzory, imunosenzory a aptasenzory (Obr. 1). Ich hlavnými výhodami sú jednoduchá konštrukcia meracieho systému, nízke náklady, výborná citlivosť a špecifickosť. Navyše, tieto systémy je možné integrovať do miniaturizovaných analytických zariadení (lab on chip), ktoré predstavujú excelentné analytické platformy pre tzv. point of care alebo on site analýzu, ktoré plne nahrádzajú komerčné laboratórne prístroje na *in vitro* diagnostiku [1, 2].



Obr. 1 Najbežnejšie typy elektrochemických biosenzorov.

Práca vznikla za podpory projektov APVV-PP-COVID-20-0036 a Visegradfund project No. 22020140.

- [1] Cho I.-H., Kim D.H., Park S.: *Biomater. Res.* 24, 6 (2020).
 [2] Bakirhan N.K., Topal B.D., Ozcelikay G., Karadurmus L., Ozkan S.A.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* DOI: 10.1080/10408347.2020.1809339.

PP2 PRÍBEH MAKOZINÓNU – O CESTE PERSPEKTÍVNEHO ANTITUBERKULOTIKA Z LABORATÓRIA KU KLINICKÝM SKÚŠKAM

Katarína Mikušová

Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra biochémiie, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, katarina.mikusova@uniba.sk

V aktuálnej dobe poznačenej svetovou pandémiou ochorenia COVID-19 neprestáva byť závažným problémom tuberkulóza (TBC), ktorá si v ľudskej histórii vyžiadala globálne najviac životov spomedzi všetkých infekčných ochorení. Liečba TBC je dlhá a náročná, v dôsledku čoho ju pacienti častokrát predčasne ukončujú a vytvárajú tak podmienky pre selekciu a šírenie rezistentných kmeňov. V súčasnosti sú známe kmene *Mycobacterium tuberculosis* – patogéna spôsobujúceho TBC, ktoré sú rezistentné na všetky dostupné liečivá. V tejto situácii je potreba vývoja nových antituberkulotík viac než zrejmá. Makozinón zo skupiny benzotiazinónov predstavuje jednu z perspektívnych molekúl, ktorá sa nachádza v druhej fáze klinických skúšok

na liečbu TBC. V prednáške priblížim vývoj tejto molekuly ruským chemikom Vadimom Makarovom, ďalej experimenty, ktoré viedli k identifikácii a charakterizácii molekulárneho cieľa benzotiazínov v rámci medzinárodných konzorcií podporených rámcovými programami Európskej únie NM4TB (New Medicines for Tuberculosis) a MM4TB (More Medicines for Tuberculosis) a súčasný stav jeho klinického vývoja.

PP3

SYNTÉZA A VLASTNOSTI ANALÓGOV VONNÝCH MOLEKÚL

Peter Szolcsányi¹, Peter Šiška,²Eva Puchľová,^{1,2} Michal Dendys,¹Vladimír Dacho¹

¹FCHPT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava

²Axxence Slovakia, Radlinského 9, 812 37 Bratislava

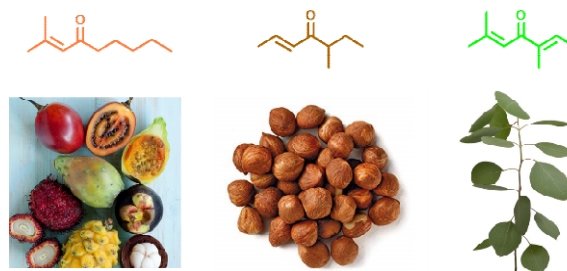
Syntéza neprírodných analógov vonných látok predstavuje zdroj nových senzoričných zlúčenín, ktoré sú nevyhnutné nielen pre výskum štruktúrno-olfaktorických korelácií (SOR), ale sú zároveň aj potenciálne využiteľné ako funkčné molekuly v parfumérii či potravinárstve[1].

Prednáška uvedie príklady štruktúrneho dizajnu, laboratórnej prípravy a senzoričných vlastností derivátov vonných aldehydov z orgovánu (*Syringavulgaris*) a orieškového filbertonu z lieskoviec (*Corylusmaxima*).

Modulárna syntéza predmetných aldehydov využíva geranyl- resp. linalylacetát ako univerzálne východiskové substráty na prípravu širokej palety neprírodných analógov (esterov, alkoholov, nitrilov) [2]. Ich senzoričná analýza jednak identifikovala aldehydickú skupinu ako kľúčový olfaktofór kvetinovej vône, dvojok poukázala na vplyv (ne)prítomnosti Me-skupín na radikálnu zmenu vonných vlastností (tzv. *magicmethyleffect*). Zaujímavým vedľajším produktom tohto výskumu bol objav štruktúrne nových trienylesterov s intenzívnou ananásovou vôňou.

Efektívna dvojstupňová syntéza neprírodných analógov filbertonu je založená na Grignardovej adícii Mg/Li-nukleofilov na komerčné aldehydy, s následnou burelovou oxidáciou intermediárnych alylalkoholov, za izolácie cieľových (di)enónov [3]. Ich senzoričná analýza ukázala, že aj minimálna štruktúrna zmena prírodného filbertonu vedie k dramatickej zmene vonných vlastností jeho syntetických derivátov, pričom pôvodná oriešková vôňa sa zmení na arómu

tropického ovocia respektíve zelenú vôňu bylín (Obr. 1).



Obr. 1 Syntetické analógy filbertonu z lieskoviec

Autori ďakujú za finančnú a projektovú podporu grantovým agentúram APPVV a VEGA, ako aj firme Axxence Slovakia Ltd.

- [1] Armano N., Charpentier J., Flachsmann F., Goeke, A., Liniger, M., Kraft, P.: *Angew. Chem.Int. Ed.* 59, 16310 (2020).
- [2] Šiška P., Fodran P., Szolcsányi, P.: *Tetrahedron* 70, 6420 (2014).
- [3] Puchľová E., Dendys M., Špánik I., Szolcsányi, P.: *Molecules* 24, 4497 (2019).

PP4

NANOSTRUCTURAL PLATFORMS FOR SUSTAINABLE ENERGY AND ADVANCED APPLICATIONS

Peter Kasak¹

¹Center for Advanced Materials, Qatar University, POBox 2713, Doha, Qatar. Peter.kasak@qu.edu.qa

This contribution is focused on fabrication processes of nanostructured material formed from organic self-assembly (nicotine amide-based supergelators), polymers (zwitterionic polymers and their copolymers), metal carbide (Mxene, WC) and alloy-based nanocomposite (Pt Pd@carbon nanotubes@reduced graphene oxide). Moreover, their application such as reusable fuel gels, controlled solution (upper critical solution temperature) and cell adhesion materials, biosensing, sustainable osmotic engine and in heterogeneous catalytic processes such as direct methanol fuel cells and hydrogen evolution reaction will be presented and discussed.

This publication was jointly supported by Qatar University and Chemical Institute, Slovak Academy of Sciences Grant IRCC-2020-004. The findings achieved herein are solely the work of the author.

PP5

ORGANICKÁ SYNTÉZA AKO DÔLEŽITÝ NÁSTROJ CHEMICKEJ BIOLÓGIEJán Matyašovský^{1,2,3} a Michal Hocek^{1,2}

¹Ústav Organické Chemie a Biochemie, Akadémie Vied České Republiky, Flemingovo nám. 2, 16610 Praha 6, Česká Republika; ²Fakulta Organické Chemie, Přírodovědecká Fakulta, Univerzita Karlova, Hlavova 8, 12843 Praha 2, Česká Republika; ³MultiplexDx, Ilkovičova 8, 84104 Bratislava 4, Slovenská republika; matyasovsky@multiplexdx.com

Multidisciplinarita vedných odborov predstavuje nenahraditeľnú súčasť vedeckého pokroku. Vedci takto získavajú vedomosti z iných vedných odvetví a zároveň môžu ťažiť z pohľadu z inej perspektívy na svoj vedný obor – multidisciplinárna veda tým zaručuje možnosť celoživotného vzdelávania vedcov.

Prelínajúci sa vzťah chémie a biológie dáva možnosť preskúmania rôznych otázok na rozhraní neživého a živého. Jedným z poslání organickej chémie je aj shana o priblíženie, vysvetlenie a mimiku zjavne pohodlných procesov prebiehajúcich v živých organizmoch. Organická syntéza predstavuje dôležitý nástroj pre dané účely, nakoľko syntéza chemických molekúl a prób s unikátnymi vlastnosťami umožňuje ciele štúdiu procesov, mechanizmov a interakcií, ktoré sú premedom záujmu vedcov a výskumných pracovníkov.

Syntéza modifikovaných nukleových kyselín polymerázovou inkorporáciou predstavuje dôležitý nástroj pre potenciálne aplikácie v chemickej biológii alebo diagnostike.¹ Enzymatická príprava upravenej DNA využíva DNA polymerázy a modifikované nukleozid trifosfáty (upravené v nukleobázovej časti; dNTPs). Zachovanie substrátovej aktivity týchto molekúl je podmienené špecifickou modifikáciou dusíkatého heterocyklu, zväčša na pozícii, ktorá zabezpečuje umiestnenie modifikácie vo veľkom žliabku DNA.² Na druhú stranu, enzymatická príprava DNA s funkčnými skupinami umiestnenými v malom žliabku DNA bola len málo preskúmaná.³

Projekt bol financovaný: Akadémie Vied České Republiky (Praemium Academiae), Grantová Agentura České Republiky (17-03419S) a Marie Skłodowska-Curie Innovative Training Network (ITN) Click Gene (H2020-MSCA-ITN-2014-642023). Zároveň patrí veľká vďaka profesorovi Michalovi Hockovi, pod ktorého vedením bol prezentovaný výskum uskutočnený.

- [1] Condon, A.: *Nat. Rev. Genet.* 7, 565 (2006).
- [2] Hocek, M.: *J. Org. Chem.* 79, 9917 (2014).
- [3] Matyašovský, J., Perlíková, P., Malnuit, V., Pohl, R., Hocek, M.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 55, 15856 (2016).

PREDNÁŠKY - SEKCIA 1: ANALYTICKÁ CHÉMIA

1P01

SPEKTROELEKTROCHEMIE JAKO NÁSTROJ PRO CHARAKTERIZACI NOVÝCH UMĚLÝCH ENZYMŮ SLOUŽÍCÍCH K ANALÝZE VYBRANÝCH NEUROTRANSMITERŮ

Romana Sokolová¹, Jana Kocábová¹, Milan Sýs²,
Tomáš Mikysek², Jan Fiedler¹, Ilaria Degano³

¹Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i.,
Dolejškova 3, 182 23 Praha 8, Česká republika, e-
mail: sokolova@jh-inst.cas.cz

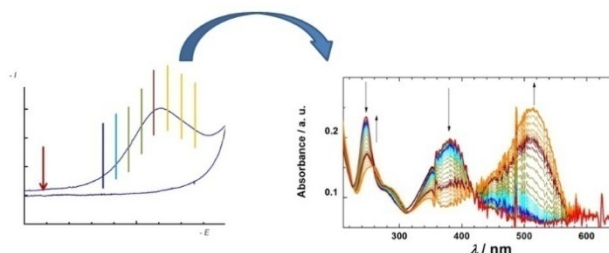
²Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-
technologická, Katedra analytické chemie, Studentská
95, 532 10 Pardubice, Česká republika

³University of Pisa, Department of Chemistry and
Industrial Chemistry, Via Moruzzi 13, 56124 Pisa,
Italy

Vývoj senzorů pro použití v analytické chemii zažívá v posledních deseti letech výrazný pokrok. Při přípravě povrchově modifikovaných elektrod je potřeba zajistit jejich účinnost a citlivost, selektivitu, a v neposlední řadě se klade důraz na stabilitu vrstvy nanosené na povrchu elektrody a její reprodukovatelnost.¹ Jednoduchým příkladem je nahrazení bio-materiálu, tj. enzymů, které mohou být za určitých podmínek nestabilní, organickými látkami, resp. komplexy přechodných kovů.

Výzkum se týká charakterizace nových typů umělých enzymů se strukturálním motivem tyrozinázy a jejich možným využitím v analýze vybraných neurotransmiterů.² Vlastnosti nových umělých enzymů jsou charakterizovány pomocí elektrochemických a spektroskopických technik. UV-Vis spektroelektrochemie je využita k určení mechanismu interakce nově syntetizovaných komplexů s 3,5-di-*terc*-butylkatecholem.

Význam a využití UV-Vis a IČ spektroelektrochemie měřené v tenkovrstvé spektroelektrochemické cele při určování mechanismu oxidace nebo redukce bioaktivních látek jsou diskutovány (Obr. 1).³



Obr.1 Schéma in situ UV-Vis spektroelektrochemie

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 19-03160S.

- [4] Sýs M., Obluková M., Kolivoška V., Sokolová R., Korecká L., Mikysek T., *J. Electroanal. Chem.* **864**, article n. 114066, 1-9 (2020).
[5] Sýs M., Mukherjee A., Jashari G., Adam V., Ashrafi A.M., Novák M., Richtera L., *Materials* **14**, 113,(2021).
[6] Sokolová R., Kocábová J., Marhol P., Fiedler J., Biedermann D., Vacek J., Křen V., *J. Phys. Chem. B*, **121**, 6841 (2017).

1P02

KONFORMAČNÍ, SPEKTRÁLNÍ A ELEKTROCHEMICKÁ ANALÝZA INSULINU

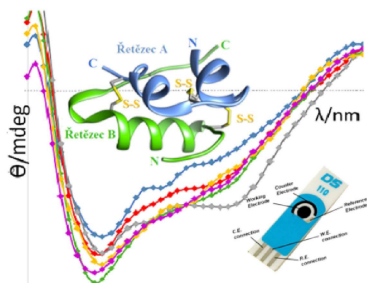
Libuše Trnková, Iveta Trísková, Nikola Nosková

Masarykova Univerzita, Přírodovědecká fakulta,
Kamenice5, 625 00 Brno, libuse@chemi.muni.cz

Insulín stojí v popředí vědeckého zájmu mnoho let a slouží jako modelový polypeptid v oblasti biochemie, farmakologie, buněčné signalizace, strukturální biologie a medicíny [1]. V poslední době je tento polypeptidový hormon, regulující hladinu glukózy v krvi, často zmiňován v souvislosti s nemocí COVID-19, neboť se zjistilo, že u pacientů s diabetes mellitus (DM) je riziko onemocnění podstatně větší. V kontextu s těmito skutečnostmi se vědci snaží nejen vytvořit levný senzor s rychlou odezvou na insulin [2], ale také poznat, jak se insulin chová v roztoku a na nabitém fázovém rozhraní, jak se mění jeho strukturální vlastnosti v závislosti na vnějším prostředí a které aminokyseliny jsou za jeho redoxní procesy zodpovědné.

Příspěvek prezentuje výsledky spektrálních a elektrochemických studií insulinu doplněné teoretickými výpočty struktur (molekulová dynamika) [3]. Oxidační procesy na nanostrukturovaných elektrodách s bismutem (BiNP) a uhlíkovými nanovláknky (CNF) jsou reflexí ke konformační dynamice insulinu sledované pomocí spekter cirkulárního dichroismu. Je diskutován rozdílný mechanismus

oxidačných procesů insulinu na ne-modifikovaných a nanočásticemi modifikovaných elektrodách spolu s otázkou, které a kolik aminokyselin oxidačnímu procesu insulinu podléhají. Výsledky naší studie mohou být nápomocné pro vývoj neenzymatických citlivých insulinových senzorů i pro biochemický výzkum insulinu v medicíně a farmacii.



Obr. 1 Teoretická a experimentální studie insulinu.

Tento výzkum byl finančně podporován projektem MUNI/A/1192/2020 (Ministerstvo školství, mládeže a tělovýchovy) a projektem VISEGRAD 22020140 (The International Visegrad Fund).

- [1] Mayer J. P., Zhang F., DiMarchi R. D.: *Biopolymers*, 88, 587 (2007).
- [2] Sisolakova I., Hovancova J., Orinakova R., Orinak A., Trnkova L., Garcia D. R., Radonak J.: *Bioelectrochemistry*. 130, 107326 (2019).
- [3] Krieger E., Koraimann G., Vriend G.: *Proteins: Structure, Function, and Genetics*. 47, 393 (2002).

1P03

ELEKTROCHEMICKÁ OXIDACE STEROLŮ S DVOJNOU VAZBOU NA STEROIDNÍM SKELETU A JEJÍ VYUŽITÍ V ELEKTROANALÝZE

Eva Bláhová, Jan Klouda, Jana Kubešová, Kristýna Jelšíková, Dominika Giampaglia, Lenka Benešová, Michal Zelenský, Karolína Schwarzová-Pecková

Katedra analytické chemie, UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Albertov 6, 128 00 Praha 2, Česká republika, karolina.schwarzova@natur.cuni.cz

Steroidní sloučeniny jsou fyziologicky významné látky zastoupené ve všech živých organismech a rostlinách. Vzhledem k časté absenci účinných chromoforů/fluoroforů v molekulách steroidů je jejich identifikace a detekce prostřednictvím UV/VIS či fluorescenční detekce komplikovaná [1-3].

V tomto příspěvku je porovnáváno elektrochemické chování sterolů s jednou dvojnou

vazbou, a sice fytosterolů (stigmasterol, β -sitosterol) a cholesterolu (všechny dvojná vazba v poloze Δ^5) a jejich prekursoru lathosterolu (poloha Δ^7). Cyklická voltametrie v prostředí 0,1 M kyseliny chloristé v acetonitrilu (obsah vody 0,55%) na borem dopované diamantové elektrodě (BDDE) a elektrodě ze skelného uhlíku (GCE) prokázala ireversibilní oxidaci při potenciálu +1.6–1.8 V na BDDE a +1.3–1.4 V (vs. Ag/AgNO₃ v acetonitrilu) na GCE pro cholesterol a lathosterol. Fytosteroly jsou oxidovány při vyšších potenciálech. Při zvyšování obsahu vody dochází k posunu potenciálů píků k pozitivnějším hodnotám a nárůstu či poklesu jejich proudové odezvy, zřejmě v důsledku rozdílné schopnosti adsorpce na studované povrchy. Steroly lze oxidovat i v nevodném prostředí acetonitrilu s obsahem chloristanu sodného či tetraalkylamoniových solí.

V příspěvku bude dále prezentována možnost analytického využití studovaných signálů. Pro pulsní voltametrické metody bylo dosaženo limitu detekce v řádu jednotek μM pro většinu studovaných sterolů. Pro cholesterol bude prezentována i možnost využití ampérometrické detekce v průtokové injekční analýze.

Tento výzkum by podpořen Grantovou agenturou České republiky (projekt GAČR 19-11268S) a Specifickým univerzitním výzkumem (SVV 260560).

- [1] Klouda J., Berek J., Nesměrác K., Schwarzová-Pecková K.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 47, 384 (2017).
- [2] Kasal A.: *Chem. Listy* 97, 921 (2003).
- [3] Klouda J., Benešová L., Kočovský P., Schwarzová-Pecková K.: *Talanta* 229, 12260 (2021).

1P04

DETEKCIA STRIEBRA V KOMERČNÝCH PRODUKTOCH NA ELEKTRODE Z DIAMANTU DOPOVANÉHO BÓROM: ELEKTROCHEMICKÁ ROZPŮŠŤACIA ANALÝZA PRI ZNÍŽENOM POTENCIÁLI ZA PRÍTOMNOSTI TIOSÍRANOVÝCH IÓNOV.

Peter Tomčík¹, Eva Culková¹, Zuzana Lukáčová-Chomisteková¹, Renata Bellová¹, Miroslav Rievaj¹

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

Skúmali sme proces elektrochemickej depozície a následného rozpúšťania iónov striebra na elektróde z diamantu dopovaného bórom (BDDE) v rôznych základných elektrolytoch pre

analytické účely. Najvyšší rozpúšťací signál striebra bol pozorovaný v $0,1 \text{ mol dm}^{-3} \text{ HNO}_3$. Strieborné ióny možno stanoviť aj v $0,1 \text{ mol dm}^{-3} \text{ Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ kde strieborný ión je silne komplexovaný ako $[\text{Ag}(\text{S}_2\text{O}_3)_2]^{3-}$. Aj keď v tomto prípade je citlivosť stokrát nižšia, potenciál anodického rozpúšťania striebra sa významne posúva smerom k negatívnym hodnotám. Tento posun by mohol byť užitočný pre riešenia niektorých interferencií, ktoré sa môžu vyskytnúť v detekčnom procese. Ako optimálny bol zvolený potenciál depozície - 0,18 V proti Ag / AgCl a doba depozície bola 240 s. Najnižší detekčný limit $2,0 \times 10^{-10} \text{ mol dm}^{-3}$ sme dosiahli pomocou DPASV v HNO_3 . Navrhovaná metóda po validácii bol použitá na analýzu reálnych vzoriek niektorých komerčných produktov so zložitou matricou. Získané výsledky sú štatisticky identické s údajmi deklarovanými výrobcom čo indikuje, že táto metóda je vhodná pre kontrolu komerčných výrobkov ako sú šampóny a rôzne dezinfekčné prípravky obsahujúce koloidné striebro a nanočastice striebra.

Autori ďakujú agentúre VEGA (projekt č. 1/0128/21) za finančnú podporu tejto práce.

[1] Culková E., Lukáčová-Chomisteková Z., Bellová R., Melicherčíková D., Durdiak J., Rievaj M., Vojs M., **Tomčík P.**: „Voltammetric Detection of Silver in Commercial Products on Boron Doped Diamond Electrode: Stripping at Lowered Potential in the Presence of Thiosulfate Ions.” *Monatshefte für Chemie* **151**, 1009–1017 (2020).

1P05 SLEDOVANIE VPLYVU MATRICE POTU NA INTERAKCIU VYBRANÝCH NANOČASTÍ S DNA

Jana Blaškovičová¹, Andrea Pečová¹, Veronika Svitková¹

¹*Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav analytickej chémie, Radlinského 9, 812 37, Bratislava, jana.blaskovicova@stuba.sk*

Nanomateriály sú látky so špecifickými vlastnosťami, ktoré nachádzajú široké uplatnenie v medicíne, kozmetike a iných odvetviach. Vďaka svojim malým rozmerom sú schopné preniknúť do buniek a interakciou s rôznymi biomakromolekulami spôsobiť ich výrazné poškodenie alebo degradáciu [1]. Využitie oxidu titaničitého a oxidu hlinitého v kozmetických prípravkoch predstavuje pre človeka zdravotné riziko. Vystavenie TiO_2 a Al_2O_3 nanočastíc (NPs)

UV žiareniu môže spôsobovať bunkovú toxicitu a poškodenie DNA a indukciu karcinogenézy. Dôležitá je rýchla analýza daných rizík pomocou jednoduchých, rýchlych, lacných a kompaktných zariadení akými sú napríklad DNA biosenzory [2, 3].

Využitím cyklickej voltampérometrie (CV) a diferenčnej pulzovej voltampérometrie (DPV) sa sledovalo vyšetrenie možnosti elektrochemickej detekcie interakcií TiO_2 a Al_2O_3 NPs s biomakromolekulou DNA v prostredí biologickej (RSw) a syntetickej (SSw) matrice potu pomocou elektrochemického DNA biosenzora a metódy biosenzingu. Pri Al_2O_3 NPs sa pozorovalo výraznejšie poškodenie DNA biosenzora s narastajúcim časom inkubácie. Z CV záznamov vplyvu UV žiarenia na interakciu matrice SSw a RSw s Al_2O_3 a TiO_2 NPs pomocou DNA biosenzora sa po 15 minútach ožarovania ukázalo ako najvýraznejšie poškodenie DNA indukované Al_2O_3 NPs v prostredí SSw. Metódou biosenzingu bolo pomocou DPV zaznamenané výrazné poškodenie DNA v prostredí SSw po vystavení UV žiareniu pre oba typy nanočastíc.

Túto prácu podporila Vedecká grantová agentúra VEGA Slovenskej republiky (Projekt č. 1/0159/20).

- [1] Blaškovičová, J. a.i.: *Electroanalysis*. 30, 698 (2018).
[2] Balasubramanyam, A. a.i.: *Mutagenesis*. 24, 245 (2009).
[3] Shi, H. a.i.: *Toxicol*. 10, 1 (2013).

1P06
CHARAKTERIZACE A VLIV ÚROVNĚ
DOPOVÁNÍ BÓREM NA
ELEKTROCHEMICKÉ VLASTNOSTI
CHEMICKO-MECHANICKY LEŠTĚNÝCH
A NELEŠTĚNÝCH
POLYKRISTALICKÝCH BÓREM
DOPOVANÝCH ELEKTROD

Michal Zelenský¹, Jan Fischer¹, Simona Baluchová^{1&2}, Andrew Taylor², Vincent Mortet², Ladislav Fekete², Ladislav Klimša², Jaromír Kopeček², Soumen Mandal³, Oliver A. Williams³ and Karolina Schwarzová-Pecková¹

¹Karlova Univerzita, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Albertov 6, 128 00 Praha 2, Česká republika

²FZÚ – Fyzikální ústav Akademie věd České republiky, v.v.i., Na Slovance 2, 182 21 Praha 8, Česká republika

³School of Physics and Astronomy, Cardiff University, Queen's Buildings, The Parade, Cardiff, CF24 3AA, UK.

Bórem dopované diamantové (BDD) elektrody mají mnoho výhod oproti běžným kovovým či sp²uhlíkovým elektrodám včetně chemické inertnosti, širokého potenciálového okna a nízkého a stabilního nabíjecího proudu, který je zapříčiněn malou diferenciální kapacitancí povrchu BDD elektrody. Výsledkem jsou vlastnosti, které vedou ke zvýšení poměru proudu signál: šum [1,2]. V tomto příspěvku jsou porovnávány dvě sady polykrystalických BDD elektrod. Jeden set elektrod je neleštěný a druhý byl podroben smíšenému chemickému a mechanickému leštění pomocí polyuretanové/polyesterové leštící látky a leštící kapaliny na bázi alkalického koloidního oxidu křemičitého [3].

Spektrální charakterizace BDD elektrod s různou úrovní dopování bórem (B/C poměr v plynné fázi během chemické depozice par: 500, 1000, 2000, 4000, 8000 ppm) byly provedeny pomocí mikroskopie atomových sil a Ramanovou spektrometrií. Elektrochemická charakterizace byla provedena pomocí cyklické voltametrie redoxních markerů vnější a vnitřní sféry jako jsou [Ru(NH₃)₆]^{3+/2+}, [Ir(Cl)₆]^{2-/3-}, ferrocen methanol a [Fe(CN)₆]^{3-/4-}. Zatímco první typ markerů vykazoval rychlou kinetiku elektronového přenosu na obou setech elektrod, u markerů vnitřní sféry docházelo na neleštěných elektrodách ke zpomalení přenosu v porovnání s leštěnými elektrodami. Leštěné elektrody tedy poskytovaly menší a relativně stálé hodnoty ΔE_p a

vyšší signály pro všechny úrovně dopování. Neleštěné elektrody vykazují velké rozdíly v kinetice elektronového přenosu, a to hlavně mezi elektrodami připravenými při nízkém a vysokém poměru B/C při depozici.

Tento výzkum byl realizován v rámci Specifického univerzitního výzkumu (SVV 260560). Finanční podpora byla poskytnuta Grantovou agenturou ČR (projekt 20-03187S).

- [1] Baluchová S., Daňhel A., Dejmková H., Ostatná V., Fojta M., Schwarzová-Pecková K.: *Anal. Chim. Acta.* 1077, 30 (2019).
- [2] Muzyka K., Sun J., Fereja TH., Lan Y., Zhang W., Xu G.: *Anal Methods.* 11, 397 (2019).
- [3] Thomas ELH., Nelson GW., Mandal S., Foord JS., Williams OA.: *Carbon.* 68, 473 (2014).

1P07
APPLICATION OF GREEN METHOD FOR
EXTRACTION OF NATURAL BIOACTIVE
COMPOUNDS

Katarína Hroboňová¹, Michal Jablonský², Soňa Malečková²

¹Slovak University of Technology in Bratislava, Faculty of Chemical and Food Technology, Institute of Analytical Chemistry, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovak Republic; katarina.hrobonova@stuba.sk

²Slovak University of Technology in Bratislava, Faculty of Chemical and Food Technology, Department of Wood, Pulp and Paper, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovak Republic

Isolation and quantification of target compounds from natural materials require methods which provide high selectivity and sensitivity. The conventional liquid extraction, Soxhlet extraction are widely used extraction techniques, however additional operations are often necessary to primary extract purification or analytes enrichment prior to their determination by chromatographic methods. Organic solvents, commonly utilized in many extraction technique, are often toxic, flammable, explosive or their biodegradability is low. Recently, analytical chemistry is moving towards the development of greener methods by minimize the use of toxic solvents and chemicals, applying design of experiments for optimization of conditions and low or medium energy instrumental consumption, and decreasing of waste. The innovative approaches in extraction techniques are dedicated to reduction of organic solvents and application of environmentally friendly solvents, in addition

to maintaining sufficient or higher extraction efficiency, selectivity and kinetics.

The paper presents the approach focused on method development using the elements of green chemistry - the design of an experiment for optimal extraction conditions, ecological extraction solvent, reusable sorbents and the evaluation of the ecological aspect of the method. Example of methods based on extraction and HPLC separation for determination of bioactive compounds in natural complex samples will be documented [1, 2].

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under contract no. APVV-18-0155 (Synthesis, compatibilization and transport of components of multifunctional systems suitable for the stabilization of cellulosic materials - MUFUSCEM).

- [1] Hroboňová K., Machyňáková A., Čížmárik J.: *J. Chromatogr. A* 1539, 93-102 (2018).
 [2] Hroboňová K., Jablonský M., Májek P.: *J. Mol. Liq.* 338, 116691 (2021).

1P08 PROBLEMATIKA SEPARACE THIOFOSFÁTOVÝCH ANALOGŮ TERAPEUTICKÝCH OLIGONUKLEOTIDŮ A JEJICH DIASTEREOMERŮ V KAPALINOVÉ CHROMATOGRÁFII (1. ČÁST – ÚVOD)

Květa Kalíková¹, Zuzana Kadlecová¹, Martin Gilar²

¹Katedra fyzikální a makromolekulární chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Hlavova 2030/8, 128 00, Praha 2, Česká republika

²Waters Corporation, 34 Maple Street, Milford, MA 01757, USA

kalikova@natur.cuni.cz

Význam a využití terapeutických oligonukleotidů v genové a antisense terapii v posledních letech významně roste [1]. „Přirozené“ oligonukleotidy jsou citlivé k buněčným nukleázám. Z tohoto důvodu se synteticky připravované terapeutické oligonukleotidy chemicky modifikují za účelem zvýšení rezistence vůči těmto enzymům, což vede ke zvýšení jejich stability *in vivo* [2]. Vhodná modifikace vede i ke zvýšení jejich účinnosti.

Jedním z často používaných postupů modifikace je tzv. thiofosfátová substituce. Při této substituci je jeden atom kyslíku (PO), který se nepodílí na fosfodiesterové vazbě, nahrazen sírou. Tato modifikace vede ke vzniku chirálního centra na atomu fosforu a tvorbě 2ⁿ diastereomerů, kde *n* je počet thiofosfátových substitucí (PS). Obecně diastereomery vykazují různé fyzikálně-chemické

vlastnosti a pro jejich separaci se využívá reverzní mód kapalinové chromatografie. V případě thiofosfátových analogů delších oligonukleotidů je situace složitější. Pokud jsou všechny PO nahrazeny PS, počet potenciálně separovatelných diastereomerů je tak vysoký, že je nelze všechny separovat na základní linii dostupnými chromatografickými technikami během jedné analýzy. Výsledkem jsou široké píky s částečně separovanými diastereomery, které nelze spolehlivě vyhodnotit. Řešením je potlačení separace diastereomerů použitím iontově-párových činidel v kombinaci s reverzní stacionární fází [3]. Úspěšná analýza je významně ovlivněna výběrem vhodných podmínek - typ a koncentrace iontově-párových činidel, teplota apod.

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky (číslo grantu:20-19655S).

- [1] Andersson S., Antonsson M., Elebring M., Jansson-Löfmark R., Weidolf L.: *Drug Discov. Today*. 1733, 23 (2018).
 [2] Goyon A., Yehl P., Zhang K.: *J. Pharm. Biomed. Anal.* 182, 113105 (2020).
 [3] Enmark M., Rova M., Samuelsson J., Örnkvist E., Schweikart F., Fornstedt T.: *Anal. Bioanal. Chem.* 411, 3383 (2019).

1P09 PROBLEMATIKA SEPARACE THIOFOSFÁTOVÝCH ANALOGŮ TERAPEUTICKÝCH OLIGONUKLEOTIDŮ A JEJICH DIASTEREOMERŮ V KAPALINOVÉ CHROMATOGRÁFII (2. ČÁST – VÝSLEDKY)

Zuzana Kadlecová¹, Martin Gilar², Květa Kalíková¹

¹Katedra fyzikální a makromolekulární chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Hlavova 2030/8, 128 00, Praha 2, Česká republika

²Waters Corporation, 34 Maple Street, Milford, MA 01757, USA

zuzkakadlecova@centrum.cz

Pro chromatografickou analýzu thiofosfátových analogů terapeutických oligonukleotidů se nejčastěji využívá reverzních stacionárních fází v kombinaci s iontově-párovými činidly [1]. V tomto příspěvku jsou diskutovány vlivy typu a koncentrace iontově-párového činidla na chromatografické parametry, které jsou klíčové pro spolehlivou kvantifikaci thiofosfátových analogů oligonukleotidů. Pro hlubší pochopení probíhajících dějů byla vybrána sada oligonukleotidů se stejnou sekvencí nukleobází, ale s různým počtem thiofosfátových modifikací.

Na této sadě byl testován vliv devíti iontově-párových činidel o různé hydrofobicitě a dvou koncentracích na retenci, separaci diastereomerů a rozlišení oligonukleotidů s různou délkou.

Získané výsledky potvrdily významný vliv počtu thiofosfátových modifikací na retenci testovaných oligonukleotidů. Oproti předpokladům se ukázalo, že rostoucí hydrofobicita iontově-párového činidla vždy neznamená rostoucí potlačení separace diastereomerů – pro vysoce hydrofobní mobilní fáze obsahující oktylamonium acetát nebo dihexylamonium acetát byla pozorována částečná separace diastereomerů a s tím související rozšířené píky. Dále bylo prokázáno, že rostoucí hydrofobicita a koncentrace iontově párového činidla významně zlepšuje rozlišení oligonukleotidů o různé délce.

Získané poznatky přispívají k lepšímu pochopení vlivu chromatografických podmínek na separaci/potlačení separace diastereomerů thiofosfátových analogů oligonukleotidů a mohou být využity při optimalizaci metod v laboratořích zabývajících se jejich analýzou a kvantifikací.

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky (číslo grantu:20-19655S).

[1] Chen X., Liu Z., Gong, L.: *Anal. Biochem.* 625, 114194 (2021).

1P10 SPOJENÍ KAPALINOVÉ MIKROEXTRAKCE DO DUTÉHO VLÁKNA S VOLTAMETRICKOU ANALÝZOU

Vojtěch Hrdlička¹, Tomáš Navrátil¹

¹Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v. v. i., Dolejškova 2155/3, 182 23 Praha 8, vojtech.hrdlicka@jh-inst.cas.cz

Kapalinová mikroextrakce do dutého vlákna (*hollow fiber-based liquid phase microextraction*, HF-LPME) se stala vyhledávanou metodou pro rychlou přípravu komplikovaných biologických vzorků (krevní plazma, lidská moč, kravské mléko atp.), nejčastěji před následnou HPLC, GC nebo CZE analýzou. Výhodami HF-LPME jsou flexibilita (podle použitého počtu fází, rozpouštědla, pH atp.), nepatrná spotřeba organických rozpouštědel a vysoké pre-koncentrační faktory, zejména pro méně polární analyty ($\log P > 2$) [1]. Přínosem HF-LPME pro elektroanalýzu je zejména zvýšení selektivity. Voltametrická analýza moči v oblasti pozitivních potenciálů je velmi často neproveditelná bez

předchozí separace elektrochemicky oxidovatelných interferentů, obvykle přítomných ve značném množství. V našich nedávných studiích byl tento problém vyřešen právě pomocí předřazené HF-LPME, která umožnila voltametrické stanovení klinických biomarkerů kyseliny vanilmandlové [3], homovanilové [3] a 5-hydroxyindolactové se sub-mikromolárními mezemi detekce a ve vzorcích lidské moči s potenciálním využitím pro screening neuroblastomu nebo monitoring hladin katecholaminů a jejich metabolitů v lidském organismu. Přednáška se bude zabývat především experimentálními uspořádáními a optimalizací HF-LPME ve spojení s voltametrií na borem dopovaných diamantových elektrodách a možnostmi zefektivnění těchto procedur při využití 3D tisku.

Projekt byl podpořen Grantovou agenturou ČR (GAČR 20-01589S).

- [1] Hansen F., Pedersen-Bjergaard S.: *Anal. Chem.* 92 (2020).
- [2] Hrdlička V., Navrátil T., Barek J.: *Jelechem* 835 (2019).
- [3] Hrdlička V., Barek J., Navrátil T.: *Talanta* 221 (2021).

1P11 VLIV KATALYTICKÉHO VYLUČOVÁNÍ VODÍKU A SEKVENCE DNA NA REDUKCI GUANINOVÝCH A CYTOSINOVÝCH ZBYTKŮ NA RTUŤOVÝCH ELEKTRODÁCH

Miroslav Fojta

Institute of Biophysics of the CAS, Kralovopolska 135, Brno, Česká republika; fojta@ibp.cz

DNA a RNA jsou elektrochemicky aktivní díky možnosti katodické redukce nebo anodické oxidace určitých nukleobází. Elektrochemické odezvy DNA jsou ovlivňovány její strukturou v důsledku rozdílů v dostupnosti zbytků bází na jedné straně v nestrukturovaných (nespárovaných) oblastech a na druhé straně v těch, které jsou přítomny ve strukturovaných segmentech DNA se spárovanými bázemi. Naše nedávná pozorování nicméně odhalila, že toto schéma je zjednodušující. Ukázalo se, že adenin (A) a cytosin (C) (na rozdíl od guaninu, G nebo thyminu, T) nebo jejich redukční produkty katalyzují vyvíjení vodíku (redukci protonů) na rtuťových elektrodách. Již dříve jsme pozorovali pozitivní vliv katalytického vyvíjení vodíku v přítomnosti cisplatinu nebo jejich aduktů s

DNA na redukci guaninu. V souladu s tím byly pozorovány pozitivní účinky elektrodových procesů zahrnujících redukci A a/nebo C na redukci G přítomných ve stejném oligonukleotidu. Při absenci A a C byla redukce G potlačena, a to jak v blokových homonukleotidových, tak v alternujících sekvencích.

Homooligonukleotidy vykazují charakteristické chování na povrchu rtuťové elektrody v závislosti na jejich složení. V případě delších bloků cytosinu dochází k jejich redukci při výrazně vyšším pH, než jaké je vyžadováno pro redukci izolovaných C, což koreluje s tendencí homo-C bloků tvořit struktury obsahujících hemiprotonované páry C⁺•C.

Tento výzkum byl podpořen projekty GAČR č. 20-03187S a EFRR reg. č. CZ.02.1.01/0.0/0.0/15_003/0000477 SYMBIT.

1P12 ELEKTROCHEMICKÁ A SPEKTROSKOPICKÁ DETEKCE INTERAKCE RŮZNYCH ŠTRUKTŮR DNA S G-KVADRUPLEXOVÝM LIGANDOM

Daniel Dobrovodský^{1,2}, Aleš Daňhel¹, Miroslav Fojta¹

¹Biofyzikální ústav AV ČR, v.v.i., Královopolská 135, 612 65, Brno

²Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Kamenice 5, 625 00, Brno
danield@ibp.cz

G-kvadruplexy (G4) sú alternatívne štruktúry DNA ktoré slúžia aj ako dôležité regulačné elementy a perspektívne ciele pre terapeutiká v liečbe rakoviny [1], vďaka čomu je o ich štúdiu stále rastúci záujem. Elektrochemické metódy, ktoré sú citlivé na rôzne štruktúry DNA [2], môžu byť použité na štúdium G4 štruktúr alebo na analýzu ich interakcií s malými molekulami (ligandami) vyvinutými ako možné liečivá. Deriváty porfyrínov patria medzi najvýznamnejšie triedy G4 ligandov.

V tejto práci boli skúmané elektrochemické vlastnosti mednatého komplexu meso-5,10,15,20-tetrakis(4-(N-metyl-pyridinium-2-yl)fenyl)-porfyrínu (Cu-TMPy2PP) a následne aj jeho interakcia s oligonukleotidami, so schopnosťou tvoriť G4 štruktúry ako aj s jedno- a dvojreťazcovými oligonukleotidami. Na tento účel bola použitá cyklická voltametria (CV) na visiacej kvapkovej ortuťovej elektróde, spolu s UV-vis absorpčnou spektroskopiou a spektroskopiou cirkulárneho dichroizmu. Titrácie monitorované pomocou uvedených

spektrálnych metód ukázali, že Cu-TMPy2PP v roztoku silne interaguje nielen s G4, ale aj s ostatnými skúmanými štruktúrnymi formami DNA, na rozdiel od komplexov tohto porfyrínu s inými kovmi skúmanými v minulosti [3]. Pomocou CV bolo zistené, že po interakcii s DNA v roztoku aj na povrchu elektródy dochádza ku výraznému posunu redukčného signálu Cu-TMPy2PP do negatívnejších potenciálov. Pomocou tohto posunu je možné odlišiť voľnú a viazanú formu tohto ligandu, no nie jeho väzbu na jednotlivé štruktúrne formy oligonukleotidov.

Táto práca bola podporená projektom SYMBIT reg. č. CZ.02.1.01/0.0/0.0/15_003/0000477 financovaným Európskym fondom regionálneho rozvoja.

- [1] Neidle S.: *J. Med. Chem.* 59, 13 (2016).
- [2] Palecek E., Bartosik M.: *Chem. Rev.*, 112, 6 (2012).
- [3] Sabater L., Fang P., Chang C., De Rache A., Prado E., Dejeu J., Garofalo A., Lin J. H., Megny J.-L., Defrancq E., Pratiel G.: *Dalt. Trans.*, 44, 8 (2015).

1P13 PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE INKLUZNÍCH KOMPLEXŮ β- CYKLODEXTRINU S KYSELINOU OLEJOVOU A NITRO-OLEJOVOU

David Novák¹, Martin Kabeláč², Barbora Komárková³, Martina Zatloukalová¹, Jan Vacek¹

¹Ústav lékařské chemie a biochemie, Lékařská fakulta, Univerzita Palackého, Hněvotinská 976/3, 779 00 Olomouc, david.novak@upol.cz

²Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Jihočeská univerzita, Branišovská 1645/31a, 370 05 Česká Budějovice, mkabelac@prf.jcu.cz

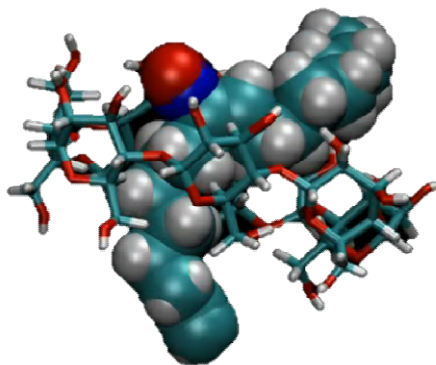
³Ústav anorganické chemie AV ČR, v.v.i., Husinec-Řež č.p. 1001, 250 68 Řež

Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava, 250 68 Praha, komarkova@iic.cas.cz

Kyselina nitro-olejová (NO₂-OA) v organismu vzniká nitrací dvojných vazby kyseliny olejové (OA) reaktivními formami dusíku. NO₂-OA řadíme mezi endogenní elektrofilní a jedná se o důležitou signální molekulu schopnou modulovat zánětlivé procesy [1].

Cyklodextriny jsou cyklické oligosacharidy vzniklé spojením šesti až osmi glukózových zbytků do prstence. Do tohoto prstence je možné inkorporovat molekulu mastné kyseliny, která je stabilizovaná pomocí vodíkových vazeb. Jedna molekula NO₂-OA je schopna tvořit inkluzní

komplex s jednou nebo dvěma molekulami β -cyklodextrinu (β -CD). Vzniklý inkluzní komplex je za běžných laboratorních podmínek v pevném skupenství, oproti čisté NO_2 -OA (kapalina). Výhodou inkluzního komplexu je zvýšení biodostupnosti a stability NO_2 -OA oproti jejímu uchovávání volně ve vodném roztoku [2]. Na základě MD simulací a předešlých prací [3] byl pro přípravu inkluzních komplexů zvolen β -CD, který má optimální velikost kavity pro inkorporaci mastných kyselin (obr. 1). Takto připravený inkluzní komplex byl podroben NMR analýze, LC-MS, analýze stability NO_2 -OA pomocí elektrochemických metod, rentgenostrukturní a také termické analýze. Pro srovnání byl použit inkluzní komplex β -CD s OA.



Obr. 1 Inkluzní komplex β -cyklodextrinu s NO_2 -OA (MD simulace).

Tato práce vznikla za podpory grantu GACR 19-21237Y a projektu IGA_LF_2021_011.

- [1] Grippo V., Mojovic M., Pavicevic A., et al.: *Redox Biol.*, 38, 101756, (2021).
 [2] Park C., Kim S., Park S., et al.: *J. Agric. Food Chem.* 50, 2977-2983 (2002).
 [3] Szenté L., Fenyvesi É.: *Struct. Chem.* 28, 479-492 (2017).

1P14

CE-ICP-MS: ANALÝZA ULTRASTOPOVÝCH KONCENTRACÍ ENANTIOMERŮ OXALIPLATINY A JEJICH NEČISTOT

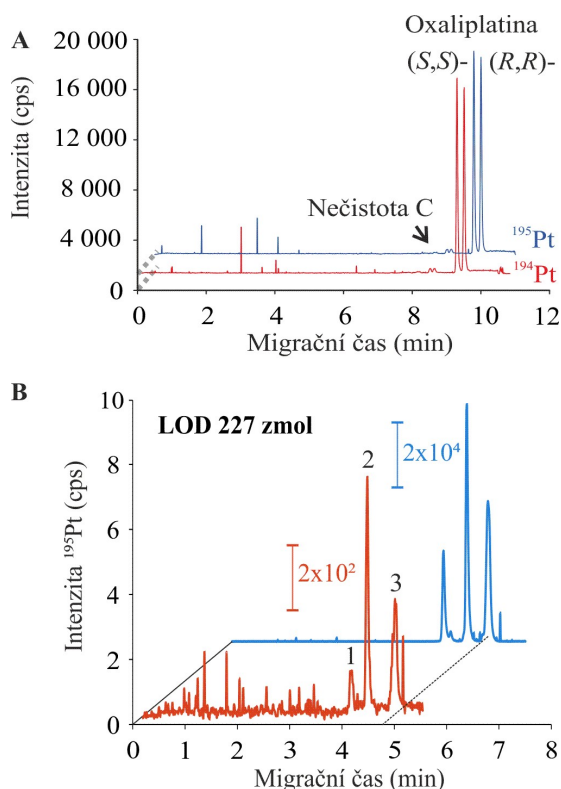
Tomáš Pluháček, Daniel Baron, Petra Švecová,
Andrea Šebestová, Radka Pechancová, Jan Petr

*Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta,
Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12,
771 46 Olomouc, tomas.pluhacek@upol.cz*

Oxaliplatina patří do skupiny platinových cytostatik je celosvětově využívána pro léčbu různých druhů nádorových onemocnění.

V léčivých přípravcích se může vyskytovat ve dvou konformacích, avšak pouze (*R,R*)-enantiomer vykazuje protinádorovou aktivitu. Průmyslovou výrobu oxaliplatiny doprovází řada vedlejších produktů (Nečistota A-E), které mohou být přítomny v obsazích menších než 0,1 %. Spojení kapilární elektroforézy s hmotnostní spektrometrií s indukčně vázaným plazmatem (CE-ICP-MS) nabízí možnost simultánní detekce enantiomerů platinových cytostatik a stopových koncentrací nečistot v různých typech vzorků od modelových až po biologické matrice.

Z tohoto důvodu jsme se zaměřili na vývoj a validaci CE-ICP-MS metod (Obr. 1) pro stanovení optické čistoty oxaliplatiny [1] a detekci ultrastopových koncentrací oxaliplatiny a jejich lékopisných nečistot s pomocí on-line prekoncentrace (sweeping-MEKC-ICP-MS) [2]. V obou případech bylo použito „in house“ CE-ICP-MS rozhraní pro spojení kapilární elektroforézy CE7100 s ORS-ICP-MS 7700x (Agilent Technologies). Validace CE-ICP-MS metod zahrnovala linearitu, mez detekce, mez stanovitelnosti, pravdivost, preciznost, mezilehlou preciznost. Validované metody byly použity pro detekci (*R,R*)- a (*S,S*)-enantiomerů v roztoku oxaliplatiny a vzorků moče, zatímco sweeping-MEKC-ICP-MS bylo využito pro ultrastopovou detekci nečistot (0,0003 %) v modelových vzorcích oxaliplatiny s variabilní koncentrací nečistot. CE-ICP-MS metody by mohly být využity v rutinních farmaceutických, klinických laboratořích pro účely kontroly kvality.



Obr 1 (A) Separace enantiomerů oxaliplatinu pomocí CE-ICP-MS (40 mM $\text{H}_3\text{BO}_3/\text{NaOH}$ pH 9,5 s 60 $\text{mg}\cdot\text{ml}^{-1}$ S- β -CD, napětí +30 kV, $c = 25 \mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$), (B) Separace oxaliplatinu a jejich nečistot pomocí sweeping-MEKC-ICP-MS (25 mM $\text{H}_3\text{PO}_4/\text{NaOH}$ pH 2,15 s 175 mM SDS, konstantní proud 95 μA , $c = 1 \mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$ (modrá), $c = 10 \text{ng}\cdot\text{ml}^{-1}$ (červená)). Pořadí analytů: 1 - Nečistota B, 2 - Nečistota C, 3 - Oxaliplatina.

Tento výzkum byl financován z projektu 19-23033S Grantové agentury České republiky.

- [1] Šebestová A., Baron D., Pechancová R., Pluháček T., Petr J.: *Talanta*, 205, 120151 (2019).
 [2] [2] Švecová P., Baron D., Schug K. A., Pluháček T., Petr J.: zasláno do *Analytica Chimica Acta*.

1P15 AUTOMATIZOVANÉ ANALYTICKÉ SYSTÉMY A ICH VYUŽITIE PRI ANALÝZE ORGANICKÝCH LÁTOK

Marek Haššo, Ľubomír Švorc

Ústav analytickej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, Bratislava, SK-812 37, Slovenská republika, marek.hasso@stuba.sk

Neustále väčšie nároky na vývoj analytických metód s ohľadom na citlivosť, selektivitu, rýchlosť, ale aj automatizáciu a finančnú stránku celkovej analýzy podnietili vývoj automatizovaných analytických systémov. Jedným z

prvých automatizovaných analytických systémov bola prietoková injekčná analýza (FIA), ktorej princíp spočíva v unášaní presného objemu vzorky pomocou nosného média spolu so skúmadlom, pričom dochádza k tvorbe reakčného produktu, ktorého signál sa zaznamenáva pomocou ampérometrickeho alebo optického detektora. Použitie FIA umožňuje urýchlenie a automatizáciu analytického procesu a poskytuje presné a reprodukovateľné výsledky analýzy. Nevýhodami FIA sú najmä vysoká spotreba reakčného, ale aj nosného média, možné problémy s prietokovými ventilmi a čerpadlami ako aj náklady spojené s likvidáciou nosného a reakčného média [1]. Ďalším typom automatizovaného analytického systému je vsádzková injekčná analýza (BIA), poskytujúca podobné výhody ako FIA, najmä z pohľadu citlivosti, reprodukovateľnosti a presnosti meraní, ale taktiež odstraňuje vyššie spomínané nevýhody vyskytujúce sa pri FIA. Výhodou automatizovaných analytických systémov je možnosť analýzy veľkého počtu reálnych vzoriek v krátkom časovom horizonte [2]. Práca sa zameriava na určenie a optimalizáciu vhodných experimentálnych podmienok, ktorých znalosť je kľúčová pri vývoji automatizovanej analytickej metódy na stanovenie diazepamu, využívajúcej BIA v spojení s ampérometrickou detekciou na bórom dopovanej diamantovej elektróde.

Autori ďakujú za podporu Vedeckej grantovej agentúry VEGA MŠ SR a SAV (projekt č. 1/0159/20) a Programom na podporu mladých výskumníkov STU.

- [1] Růžička J., Hansen E. H.: *Anal. Chim. Acta*. 78, 1 (1975).
 [2] Quintino S. M. M., Angnes L.: *Electroanalysis*. 16, 7 (2004).

1P16 ELEKTROCHEMICKÁ IMPEDANČNÍ SPEKTROSKOPIE NA VRSTVÁCH POLYSTYRENOVÝCH NANOČÁSTIC

Jakub Sopoušek^{1,2}, Karel Lacina²

¹Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Kamenice 5, Brno, jakubsopousek@gmail.com
²CEITEC, Masarykova univerzita, Kamenice 5, Brno

Elektrochemická impedanční spektroskopie (EIS) je vhodnou metódou pro charakterizaci dějů na rozhraní elektroda/roztok. Za použití EIS jsme studovali nanoporézní matrice na pevné bázi, které jsou tvořené nahusto uspořádanými vrstvami polystyrénových nanočástic. Díky hexagonálnímu uspořádání takových vrstev jsou

v maticích prítomné nanopóry o špecifickom rozmere. Takové nanopóry môžu byť modifikované receptory a následnou interakciou s ligandami blokované, čo má za následok značný nárast odporu prenosu náboje. Týmto spôsobom lze priamo detekovať protilátky navázané na imobilizovanom špecifickom antigene, a využiť tak tento koncept pre point-of-care diagnostiku chorob z krvi či krvného séra pacienta.

Pri charakterizácii vrstev nanočastíc a jejich modifikáci jsme odhalili mnoho efektů, které mají dominantní vliv na elektrochemickou odpověď. Elektrochemická impedance za použití redoxní značky byla mimo sterické bránění imobilizovanými komponentami značně ovlivněna tím, jak byl povrch v daném pH nabitý [1]. Velice zajímavým jevem byla impedanční odpověď obsahující dvě domény odporu prenosu náboje z důvodu neuniformního uspořádání elektrické dvojvrstvy ve vícevrstevných maticích [2]. Veškeré měření bylo také silně závislé na iontové síle prostředí – impedanční výsledky za vysoké iontové síly prostředí byly ovlivněny zejména sterickým bráněním imobilizovaných komponent, zatímco za nízké iontové síly nábojem těchto komponent [3].

Tento výzkum byl financován Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy pod projektem CEITEC 2020 (LQ1601) a Grantovou agenturou České republiky, grant 19-16273Y. Sopoušek J. vděčí finanční podpoře za ocenění Brno Ph.D. Talent 2018 od Brněnské správní jednotky, JCMM, z.s.p.o.

- [1] Sopoušek J., Věžník J., Skládal P., Lacina K., *ACS Appl. Mater. Interfaces* 12, 14620–14628 (2020).
- [2] Sopoušek J., Humlíček J., Hlaváček A., Horáčková V., Lacina K., *Electrochimica Acta* 368, 137607 (2021).
- [3] Sopoušek J., Věžník J., Houser J., Skládal P., Lacina K., *Electrochimica Acta* 388, 138616 (2021).

1P17

ELEKTROANALÝZA OLIGO-G RNA V ZMESI S 3',5'-CYKlickÝM GUANOZÍN MONOFOSFÁTOM ZA VYUŽITIA SELEKTÍVNEJ DESORPCIE MONOMÉROV Z POVRCHU ELEKTRÓDY

Ondrej Hesko, Miroslav Fojta, Jan Špaček

Biofyzikální ústav AV ČR, v.v.i., Královopolská 135,
612 65 Brno, Czech Republic, hesko@ibp.cz

Cyklický guanozín monofosfát (cGMP) môže spontánne polymerizovať formujúc oligo-

nukleotidy RNA za podmienok simulujúcich prebiotické prostredie [1]. Táto práca sa zaoberá metódou pre rýchlu detekciu krátkych polymerizačných produktov prítomných v nadbytku cGMP. Metóda je založená na detekcii oxidačného signálu guanínu (G^{ox}) poskytovaného adsorbovanou RNA na povrchu pyrolytickej grafitovej elektródy (PGE) [2]. Pri meraní RNA oligonukleotidov v zmesi s cGMP adsorbovaných na PGE, dochádza ku prekryvaniu G^{ox} . Pre stanovenie jednotlivých zložiek zmesi, bola navrhnutá metóda založená na selektívnom odstránení monomérov. V prvom kroku sa cGMP aj RNA adsorbujú na povrch PGE, následne sa cGMP selektívne desorbuje pomocou rôznych roztokov surfaktantov (SDS, Tween 20 alebo Triton X-100) alebo za pomoci zvýšenej teploty. K posúdeniu účinnosti selektivity každého premývacieho postupu bola využitá lineárna voltametria. V selektívnej desorpcii cGMP boli všetky testované surfaktanty úspešné. Tween 20 poskytoval najlepší pomer medzi desorbovaným cGMP a oligomérmi ktoré ostali naadsorbované na PGE. Premývanie elektródy v Milli-Q vode pri 70°C vykazovalo najlepšie výsledky z pomedzi všetkých techník.

Prezentovaná *in situ* technika separácie biomolekúl je v elektrochémií jedinečná. Je rýchlejšia a využíva menej materiálu ako iné súčasné metódy – hmotnostná spektrometria alebo gélová elektroforéza. Tento prístup môže rozšíriť využitie PGE v analýzach neenzymatických alebo enzymatických polymerizačných reakciách a pri vývoji biosenzorov.

Táto práca vznikla za podpory projektu SYMBIT reg. č. CZ.02.1.01/0.0/0.0/15_003/0000477 financovaného z ERDF, Grantovej agentúry Českej republiky (grant No. 20-03187S) a CAS (No. 68081707).

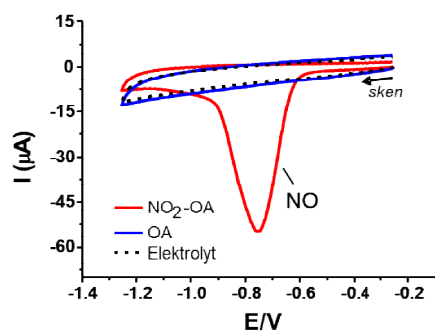
- [1] Šponer J.E., Šponer J., Giorgi A., Mauro E., Pino S., Costanzo G.: *J. Phys. Chem. B.* 119 (2015)
- [2] Špaček J., Daňhel A., Hasoň S., Fojta M.: *Electrochem. Commun.* 82 (2017) 34–38.

1P18 ELEKTROCHEMICKÁ CHARAKTERIZACE NITROVANÝCH MASTNÝCH KYSELIN A JEJICH INTERAKCE S VYBRANÝMI NUKLEOFILY

Martina Zatloukalová, David Novák, Jan Vacek

Ústav lékařské chemie a biochemie, Lékařská fakulta,
Univerzita Palackého v Olomouci, Hněvotínská 3,
Olomouc 775 15, martina.zatloukalova@seznam.cz

Nitrované mastné kyseliny (NO₂-MK) mohou vznikat endogenně interakcí reaktivních forem dusíku s nenasycenými mastnými kyselinami. NO₂-MK jsou pleiotropními modulátory buněčných procesů a podílí se na regulaci homeostázy. NO₂-MK řadíme mezi elektrofilní látky, které mohou za určitých podmínek reagovat s biologicky významnými nízkomolekulárními nukleofily, peptidy nebo proteiny [1]. Cílem této studie bylo zkoumat oxidačně-redukční přeměny vybraných NO₂-MK. Nitro skupina NO₂-MK podléhá ve vodném prostředí elektrochemické redukci přibližně při potenciálu -0.8 V (Ag/AgCl/3M KCl) [2]. Na základě změn potenciálu a plochy redukčního píku (označen „NO“ v obr. 1) byla studována reaktivita, stabilita a interakce vybraných NO₂-MK s biologicky významnými nukleofily.



Obr. 1. Cyklická voltametrie 20 µM nitrované kyseliny olejové (NO₂-OA) a kyseliny olejové (OA) v 0.1 M fosfátovém pufru (pH 7.4).

Interakce NO₂-MK s proteiny byla studována pomocí chronopotenciometrické rozpouštěcí analýzy konstantním proudem (CPSA). CPSA nám umožňuje v jednom elektrochemickém záznamu pozorovat jak redukční pík NO, tak i elektrokatalytické procesy, do kterých jsou zapojeny aminokyselinové zbytky zkoumaných proteinů jako je Cys, His a Lys.

Tato práce vznikla za podpory GACR 19-21237Y.

[1] Schopfer F.J., Khoo N.K.H.: *Trends Endocrinol. Metab.* 30, 505-519 (2019).

[2] Zatloukalova M., Mojovic M., Pavicevic A., Kabelac M., Freeman A. B., Pekarova M., Vacek J.: *Redox. Biol.* 24, 101213, (2019).

1P19 VOLTAMERICKÉ STANOVENÍ LÉČIVA ATOMOXETINU S VYUŽITÍM LABORATORNĚ PŘIPRAVENÉHO TIŠTĚNÉHO SENZORU S CHEMICKY DEPONOVANOU BOREM DOPOVANOU DIAMANTOVOU ELEKTRODOU

Renata Šelešovská¹, Tomáš Navrátil², Oleksandr Matvieiev¹, Marian Vojs³, Pavol Michniak³, Marián Marton³, Jaromíra Chýlková¹, Lenka Janíková¹

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

² Ústav fyzikální chemie Jaroslava Heyrovského Akademie věd České republiky, Dolejškova 3, 182 23 Praha 8, Czech Republic

³ Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta informatiky a informačních technologií, Ústav elektroniky a fotoniky, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, Slovenská republika

Voltametrické chování léčiva atomoxetinu (ATX) [1], které se používá při léčbě symptomů hyperkinetické poruchy (ADHD), bylo studováno s využitím klasické („bulk“) borem dopované diamantové elektrody (BDDE). Tato elektroda byla vybrána pro své výjimečné elektrochemické vlastnosti jako široké potenciálové okno, nízké proudové pozadí, dobrou chemickou odolnost, nízký proudový šum a odolnost vůči pasivaci [2]. Bylo zjištěno, že ATX poskytuje dva významné dobře vyvinuté anodické píky, které byly nejlépe vyhodnotitelné v prostředí Brittonova-Robinsonova pufru o pH 2. Byla vyvinuta metoda pro jeho stanovení s využitím diferenční pulzní voltametrie, která umožnila dosažení širokého lineárního dynamického rozsahu ($2,5 \times 10^{-7}$ – $2,0 \times 10^{-5}$ mol L⁻¹) a nízké meze detekce ($3,7 \times 10^{-8}$ mol L⁻¹). Tato nová metoda byla úspěšně aplikována při stanovení ATX v modelových roztocích i reálném vzorku farmaceutického přípravku. Další část práce byla zaměřena na převedení nové metody na tištěné senzory (SPEs) s chemicky deponovanou BDDE, jejichž hlavní výhodou je nízká cena a možnost snadné hromadné výroby, díky které je lze použít jako jednorázové senzory [3]. Byly testovány 2 typy těchto senzorů, komerčně dostupný SP/BDDE a laboratorně připravený (LM) SP/BDDE. Součástí této práce jsou také elektrochemické

charakterizace nově zavedeného LM-SP/BDDE senzoru. Elektroodové procesy probíhající na všech testovaných elektrodách byly podrobně zkoumány s využitím eliminační voltametrie s lineárním skenem (EVLS).

This work was supported by the grant project of The Czech Science Foundation (project No. 20-01589S) and by The University of Pardubice (projects No. SGSFChT_2021_003), Operational Program Integrated Infrastructure for the project: "Strategic research in the field of SMART monitoring, treatment and preventive protection against coronavirus (SARS-CoV-2)", Project no. 313011ASS8, co-financed by the European Regional Development Fund and VEGA grant No. 1/0554/20.

- [1] Yu G., Li G.F., Markowitz J.S.: *J. Child Adolesc. Psychopharmacol.* 26, 314 (2016).
- [2] Schwarzova-Peckova K., Vosahlova J., Berek J., Sloufova I., Pavlova E., Petrak V., Zavazalova J.: *Electrochim. Acta* 243, 170 (2017).
- [3] Li M., Li Y.T., Li D.W., Long Y.T.: *Anal. Chim. Acta*, 734, 31 (2012).

1P20 ELECTROCHEMICAL ANALYSIS OF HISTONES AT THE CHARGED ELECTRODE SURFACE

Eva Melníková¹, Olívia Dakošová¹, Tatiana Gálicová², Miroslav Gál¹, Veronika Ostatná²

¹ Department of Inorganic Technology, Slovak University of Technology, Faculty of Chemical and Food Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia, eva.melnikova@stuba.sk

² Institute of Biophysics of the Czech Academy of Sciences, Královopolská 135, 61265 Brno, Czech Republic

Histones are small basic proteins with an essential role in the nucleosome to stabilize negatively charged DNA inside the chromatin. The histones contain a large number of electroactive residues, namely arginine and lysine which participate in catalytic hydrogen evolution reaction (CHER)^{1,2}. To understand more about histone's behavior at charged surfaces and the influence of electroactive amino acid residues content on CHER, we studied histones using chronopotentiometric stripping analysis (CPS) and impedance measurements of $C_d - t$ curves. Application of these methods appeared useful for analysis of complex systems and we could discriminate between individual single-core histones and their complex – octamer.

This study was supported by project No. 18-18154S to VO and by the Slovak Research and Development Agency under the contracts no. APVV-17-0149, APVV-17-01.

- [1] Dorčák, V., Vargová, V., Ostatná, V., Paleček, E.: *Electroanalysis*, 27, 910-916 (2015).
- [2] Melníková, E., Izadi, N., Gál, M., Ostatná, V.: *Electroanalysis*, 31, 1868-1872 (2019).

1P21 SLEDOVANIE ZMIEN GLYKÁNOVÉHO ZLOŽENIA SÉR A PLAZMY VO VZORKÁCH TEHOTENSKEJ CUKROVKY NA LEKTÍNOCH ZALOŽENOU MICROARRAY METÓDOU

Lucia Pažitná¹, Kristína Kianičková¹, Paras Kundalia¹, Zorana Dobrijević², Nikola Gligorijević², Goran Miljuš², Ana Penezić², Dragana Robajac², Miloš Šunderić², Olgica Nedić², Vesna Mandić Marković^{3,4}, Željko Miković^{3,4}, Ognjen Radojičić⁴, Jaroslav Katrlík¹

¹Chemický ústav SAV, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovensko, chemlpaz@savba.sk

²Institute for the Application of Nuclear Energy (INEP), University of Belgrade, 11080 Belgrade, Serbia

³Faculty of Medicine, University of Belgrade, 11000 Belgrade, Serbia

⁴Gynecology and Obstetrics Clinic "Narodni front", Belgrade, Serbia

Podľa WHO je diabetes jednou z najčastejších príčin úmrtí na svete. V súčasnosti postihuje približne 442 miliónov ľudí a toto číslo neustále narastá. Jedným z typov diabetu je gestačný diabetes mellitus nazývaný aj tehotenská cukrovka (GDM). Táto v tehotenstve najčastejšie sa vyskytujúca metabolická porucha ohrozuje nielen zdravie matky, ale aj dieťaťa [1]. V súčasnosti sa na diagnostiku používa orálny glukózový tolerančný test, ktorý je zdĺhavý. V záujme skrátenia času na diagnostiku a zlepšenia komfortu pacientiek sa hľadajú postupy a biomarkery, ktoré by tento proces vylepšili. Ako potenciálne biomarkery sa javia glykány. Nedávna štúdia dokázala prostredníctvom N-glykánového profilu rozlíšiť zdravých jedincov od pacientov s diabetom typu 2 [2]. Na základe toho predpokladáme, že glykány majú potenciál indikovať GDM.

V pilotnej štúdii sme sa zamerali na sledovanie zmien N-glykánového profilu sér a plazmy tehotných žien s a bez GDM prostredníctvom microarray metódy založenej na lektínoch [3]. Ako biorozpoznávací prvok boli použité lektíny rôznej špecificity, pomocou ktorých bolo možné

zostaviť glykánové profily jednotlivých skupín pacientiek a porovnať ich.

Naša metóda je vhodná na sledovanie glykozylačných zmien séra a plazmy pri GDM. Dalším krokom bude meranie glykánového profilu vzoriek izolovaného fibrinogénu a trombocytov a porovnávanie výsledkov s cieľom vytipovať potenciálne glykánové biomarkery GDM.

Táto práca bola podporená grantami APVV DS-FR-19-0034, APP0061 a MESTDRS 451-03-68/2020-14/200019. Táto publikácia vznikla vďaka podpore v rámci Operačného programu Integrovaná infraštruktúra pre projekt: Centrum pre pokročilé terapie chronických zápalových ochorení pohybového aparátu, ITMS: 313011W410, spolufinancovaný zo zdrojov Európskeho fondu regionálneho rozvoja. Táto publikácia vznikla vďaka podpore OZ Preveda.

- [1] Plows et al., 2018. The Pathophysiology of Gestational Diabetes Mellitus, *International Journal of Molecular Sciences*, 19, 3342.
- [2] Rudman et al., 2019. Altered N-glycosylation profiles as potential biomarkers and drug targets in diabetes. *FEBS Letters*, 593, 1598-1615.
- [3] Zámorová et al., 2017. Analysis of changes in the glycan composition of serum, cytosol and membrane glycoprotein biomarkers of colorectal cancer using a lectin-based protein microarray, *Analytical Methods*, 18, 2660-2666.

1P22 SLEDOVANÍ GLYKÁNOVÝCH PROFILOV HCG AKO IDENTIFIKÁCIA REZISTENCIE BUNKOVÝCH LÍNIÍ NA CIS-PLATINU

Michal Híreš¹, Eduard Jáné¹, Michal Mego^{2,3}, Michal Chovanec², Katarína Hainová², Peter Kasák⁴, Tomáš Bertók¹, Ján Tkáč¹

¹ *Chemický ústav SAV, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovensko;* ² *Jednotka translačného výskumu LFUK a NOÚ, Klenová 1, 833 10 Bratislava, Slovensko;* ³ *II. onkologická klinika LF UK a NOÚ, Klenová 1, 833 10 Bratislava, Slovensko;* ⁴ *Center for Advanced Materials, Qatar University, P.O. Box 2713, Doha, Qatar*

Medzi rakoviny s rastúcim výskytom na území Slovenska patria práve nádory semenníkov (NS) [1]. Ochorenie má často histologicky rôzny pôvod a aj preto sa spoliehať na kvantitatívne stanovenie určitého biomarkera v krvi nie je dostatočné. Riešením sa ukazuje sledovanie okrem iného glykozylačných zmien vybraných molekúl [2]. Pozorovali sme zmeny v glykozylácii ľudského chorionového gonadotropínu (hCG) ako jedného z klasických sérových biomarkerov NS. Analyzovali sme tri bunkové línie (BL) NS

(NCCIT, NTera-2 a TCam2) a jednu BL ženského pôvodu (JEG3). Výber vhodných protilátok a štandardov sme vykovali na základe meraní povrchovej plazmónovej rezonancie. Porovnali sme cis-platina senzitivne aj rezistentné klony sledovaných BL technikou ELLA (Enzyme Linked Lectin Assay). Pomocou imobilizovaných protilátok boli špecificky vychytené molekuly hCG z frakcií bunkových lyzátov a následne vykonané glykoprofilovanie pomocou 17 lektínov. Výsledky naznačujú, že lektín DBA (*Dolichos biflorus* agglutinin) dokáže špecificky rozlíšiť senzitivne klony BL od rezistentných foriem. Ďalšie lektíny predikujú mieru rezistencie na cis-platinu.

Táto práca bola podporená VEGA grantmi 2/0130/20 a 2/0090/16, grantom APVV-17-0300 a grantom MZ SR 2018/23-SAV-1. Práca vznikla za podpory v rámci Operačného programu Integrovaná infraštruktúra pre projekt CEMBAM (Center for Medical Bioadditive Research and Production) ITMS: 313011V358, spolufinancovaného zo zdrojov Európskeho fondu regionálneho rozvoja.

- [1] D. Ondruš a M. Ondrušová: *Via Pract.*, vol. 7, no. 2, pp. 52–56 (2010)
- [2] E. Landhuis: *Nature*, vol. 547, no. 7661. Nature Publishing Group, pp. 127–129 (2017)

1P23 NEJISTOTA MĚŘENÍ V CHEMII - SOUČASNÉ TRENDY

David Milde¹

¹ *Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, david.milde@upol.cz*

Nejistota měření patří již více než 20 let mezi základní parametry popisující spolehlivost výsledků měření v řadě přírodovědných oborů. Ze dvou základních způsobů vyhodnocení – „zdola nahoru“ a „shora dolů“ převažuje ve většině chemických laboratoří ten druhý využívající výsledky získané během validace postupů měření a případně data z vnitřního řízení kvality. V posledních několika letech se problematika vyhodnocení nejistoty měření soustředí zejména na posuzování shody s limitní hodnotou a na velikost složky z odběru vzorku k celkové nejistotě měření.

Příspěvek představí možnosti vyhodnocování nejistoty měření způsobem „shora dolů“ na problematice sledování elementárních nečistot v léčivých přípravcích [1]. Na stejném příkladu bude představen i význam nejistoty měření u

posuzování shody s limitní hodnotou. Dále bude představena problematika nejistoty související s odběrem vzorků a využití faktoru nejistoty [2] pro odhad celkové nejistoty měření.

Poděkování MŠMT ČR za finanční podporu v rámci projektu LTV 20008.

- [1] Milde D., Pluháček T. Kuba M., Součková J., Bettencourt da Silva R. J. N.: *Talanta* 220, 121386 (2020). Jerigova M.: *Applied Surface Science*. 225, 4 (2008).
- [2] Milde D. (ed.): *Kvalimetrie 25: Nejistota vzorkování*. Eurachem-ČR, Ústí nad Labem 2020. (ISBN 978-80-86322-13-1)

1P24 ELEKTRÓDA Z DIAMANTU DOPOVANÉHO BÓROM AKO VOLTAMPÉROMETRICKÝ SENZOR PRE CETIRIZÍN

Eva Culková¹, Zuzana Lukáčová-Chomisteková¹, Renata Bellová¹, Danica Melicherčíková¹, Jaroslav Durdiak¹, Miroslav Rievaj¹, Peter Tomčík¹

¹*Katedra chémie a fyziky, Pedagogická fakulta, Katolícka univerzita v Ružomberku, Hrabovská cesta 1, 034 01 Ružomberok, eva.culkova@ku.sk*

V tomto príspevku predstavujeme veľmi jednoduchú a rýchlu elektroanalytickú metódu pre stanovenie antihistaminika cetirizínu na chemicky nemodifikovanej elektróde z diamantu dopovaného bórom (BDDE). Elektrochemické správanie cetirizínu na holej BDDE sa skúmalo cyklickou voltampérometriou v základných elektrolytoch s rôznym pH. Signál cetirizínu silne závisí od pH základného elektrolytu. Cetirizín poskytuje jeden dobre vyvinutý oxidačný pík pri potenciáli 1 V vs. Ag/AgCl v 0.1 mol L⁻¹ fosfátovom tlmivom roztoku s pH = 8 a žiadny redukčný pík. Ireverzibilný oxidačný proces cetirizínu je limitovaný difúziou a zahŕňa rovnaký počet elektrónov a protónov. Kinetika prenosu náboja sa študovala linear sweep voltampérometriou (LSV) a charakterizovala sa odhadom základných kinetických parametrov ako sú formálne potenciály (1,310 – 0,821 V), koeficienty prenosu náboja (0,18 – 0,30) a štandardné heterogénne rýchlostné konštanty (2,3 – 1,4 × 10⁻⁴ cm s⁻¹). Analytické charakteristiky sa vyšetrovali optimalizovanou diferenčnou pulzovou voltampérometriou. Navrhnutou technikou sa dosiahol detekčný limit 1,6 × 10⁻⁸ mol L⁻¹, ktorý je významne nižší oproti elektróde zo sklovitého uhlíka. Metóda sa po validácii pomocou modelových a “spiked” vzoriek úspešne aplikovala na analýzu cetirizínu vo

farmaceutických preparátoch a ľudskom moči, ktoré slúžili ako reálne vzorky. Výsledky sú v dobrej zhode s hodnotami deklarovanými výrobcom a rovnako aj s výsledkami získanými nezávislou HPLC-UV metódou.

Autori ďakujú agentúre VEGA (projekt č. 1/0128/21) za finančnú podporu tejto práce.

- [1] Culková E., Lukáčová-Chomisteková Z., Bellová R., Melicherčíková D., Durdiak J., Timko J., Rievaj M., Tomčík P.: *Int. J. Electrochem. Sci.* 13, 6358 (2018).

1P25 DETECTION OF ZAG GLYCOPROTEIN AS A POTENTIAL PROSTATE CANCER BIOMARKER

Štefánia Hrončeková¹, Tomáš Bertók¹, Ján Tkáč¹

¹*Chemický ústav SAV, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovenská republika, chemshrn@savba.sk*

This work is focused on analysis of zinc-alpha-2-glycoprotein, ZAG. ZAG is expressed in various tissues, including several types of secretory epithelial cells. Several studies suggest that in the early stages of the disease there is an increase in the level of ZAG in both urine and blood serum, which makes ZAG a possible cancer biomarker [1,2]. In this work, ZAG was detected using lateral flow immunoassay (LFA) and modified immunoassays. Measured data showed that concentration of ZAG in blood sera ranges from 1.08-1.73 µg.ml⁻¹. At the same time, no significant concentration differences were observed between samples of healthy specimens and patients having prostate cancer (PCa). Using ELISA-derived detection format and logistic regression, better discrimination of the healthy and PCa individuals was achieved. AUC value of ROC analysis yielded value of 0.70+ when several markers were combined.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency APVV 17-0300.

- [1] Katafigiotis, I., Tyrizis, S.I., Stravodimos, K.G., Alamanis, C., Pavlakis, K., Vlahou, A., Makridakis, M., Katafigiotti, A., Garbis, S.D., Constantinides, C.: *BJU Int.* 110, 11b (2012).
- [2] Cao, R., Ke, M., Wu, Q., Tian, Q., Liu, L., Dai, Z., Lu, S., Liu, P.: *J. Cell. Physiol.* 234, 10 (2019).

1P26

GLYCOMIC TECHNOLOGY FOR GLYCO-TARGET DISCOVERY

Juvisan Aguedo¹, Lenka Lorencova¹, Zuzana Pakanova¹, Jan Tkac¹

¹Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dubravská cesta 9, 845 38 Bratislava, aguedo-ariza@savba.sk, jan.tkac@savba.sk

Glycomics studies glycome, focusing on the structure and function of glycans present in a cell. Recent evidence has showed that glycosylation dramatically changes during cancer and different human diseases^{1,2}. Is very challenging to identify disease-related glycans due to the diverse microheterogeneity and low abundance in the human glycome. Therefore, high-throughput, quantitative analysis using mass-spectrometry-based and a combination of glycomic techniques were used to find out clinically relevant glycan biomarkers, this is the case of fucosylated proteins.

In our study N-linked glycans were released from serum and standard glycoproteins by PNGase F, different strategies such as permethylation, derivatization and treatment with exoglycosidases were conducted to enhance the ionization efficiency for MS-based glycomics analysis.

Fucosylated proteins are promising targets with aberrant glycosylation and can be recognized by several lectins such as *Aleuria aurantia lectin* (AAL), *Recombinant Prokaryotic Lectin for alpha-linked Fucose* (RPL-Fuc1) and *Ralstonia solanacearum* (RSL) using complementary methods such as Surface Plasmon Resonance and Electrochemical methods.

The authors would like to acknowledge for the financial support from the Innovative Training Network (no. 813120) and the Ministry of Health of the Slovak Republic under the project registration number 2019/7-CHÚSAV-4.

- [1] Llop, E., P. E Guerrero, A. Duran, S. Barrabés, A. Massaguer, M. José Ferri, M. Albiol-Quer, R. de Llorens and R. Peracaula (2018). "Glycoprotein biomarkers for the detection of pancreatic ductal adenocarcinoma." *World journal of gastroenterology* 24(24): 2537-2554.
- [2] Tkac, J., T. Bertok, M. Hires, E. Jane, L. Lorencova and P. Kasak (2019). "Glycomics of prostate cancer: updates." *Expert Rev Proteomics* 16(1): 65-76.

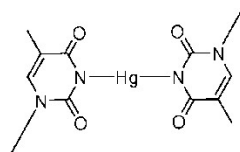
1P27

INTERAKCE IONTŮ RTUTI S HOMOTHYMINOVÝMI ÚSEKY DNA NA RTUŤOVÉ ELEKTRODĚ

Monika Hermanová¹, Zuzana Soldánová¹, Hana Pivoňková¹, Miroslav Fojta¹

¹Biofyzikální ústav AV ČR v.v.i., Královopolská 135, 61265 Brno, Česká republika, hermanova@ibp.cz

Kromě přirozeného způsobu párování bází v DNA pomocí vodíkových můstků [1] existuje i možnost tvorby párů bází prostřednictvím iontů přechodných kovů. Takto mohou vznikat páry thymin-thymin, v nichž je mezi atomy dusíku v poloze 3 obou thyminových zbytků vázán atom rtuti (obr. 1). Obdobně může docházet ke vzniku cytosinových párů prostřednictvím iontů stříbra [2]. Tvorby komplexů T-Hg-T bylo využito ve vývoji biosenzorů pro detekci rtuti, které jsou založené na sledování konformačních změn DNA po navázání atomů rtuti [3]. V této práci jsme naopak využili možnost sledovat zastoupení thyminových zbytků v DNA adsorbované na povrchu elektrody pomocí interakce s ionty rtuti generovanými přímo anodickou oxidací materiálu visící rtuťové kapkové elektrody (HMDE). Při cyklické voltametrii byly pozorovány píky odpovídající redukcí a oxidaci iontů rtuti, a to specificky pouze pro oligonukleotidy obsahující homothyminové úseky. V případě oligonukleotidů lišících se počtem thyminových zbytků (oligonukleotidy odvozené z telomerních sekvencí různých organismů) docházelo k růstu signálů rtuti s rostoucím počtem thyminových zbytků a již tři thyminové zbytky v bloku stačily k tomu, aby byly signály odpovídající tvorbě komplexů se rtuťí dobře patrné. Tento přístup tedy může být použit jak k detekci přítomnosti homothyminových úseků, tak potenciálně i k odhadu jejich délky.



Obr. 1 Komplex T-Hg-T.

Tato práce vznikla s podporou projektu GAČR č. 20-03187S.

- [1] Paleček E., Bartošík M.: *Chem. Rev.* 112, 6 (2012).
- [2] Ono A., Torigoe H., Tanaka Y., Okamoto I.: *Chem. Soc. Rev.* 40, 12 (2011).
- [3] Martín-Yerga D., Costa-García A.: *Curr. Opin. Electrochem.* 3, 1 (2017).

PREDNÁŠKY - SEKCIA 2: FYZIKÁLNA CHÉMIA

2P01

KDE SA VZALI CHEMICKÉ PRVKY VO VESMÍRE

Martin Venhart

Fyzikálny ústav SAV, Podpredseda SAV

Chemické prvky možno rozdeliť podľa pôvodu na šesť skupín. Niektoré prvky boli vytvorené už v primordiárnej nukleosyntéze bezprostredne po Veľkom tresku. Ďalšie prvky vznikli jadrovými reakciami vo hviezdach počas ich života. Niektoré prvky boli vyprodukované pri katastrofických udalostiach vo vesmíre ako sú explózie supernov alebo zrážky neutrónových hviezd. Pomerne špecifickou skupinou sú prvky pochádzajúce z jadrových reakcií v medzi-hviezdnom priestore. Niektoré prvky sú produktami rádioaktívnej premeny. Poslednou skupinou sú prvky umelo pripravené človekom. Tieto procesy skúma interdisciplinárny odbor: jadrová astrofyzika. Jej úlohou je vysvetliť jednotlivé mechanizmy vzniku a zastúpenie prvkov a ich izotopov vo vesmíre a na Zemi. V rámci prednášky budú predstavené základné mechanizmy, ktoré stoja za jednotlivými procesmi vo vesmíre. Postupne nám tak pred očami vyrastie periodická tabuľka ako ju poznáme dnes. V momente Veľkého tresku pred takmer štrnástimi miliardami rokov však bola úplne prázdna.

[1] Kalinska, Z. Padělková, J. Švorec, P. Segřa, M. Melnik: *Polyhedron* 50 (2013) 546.

2P02

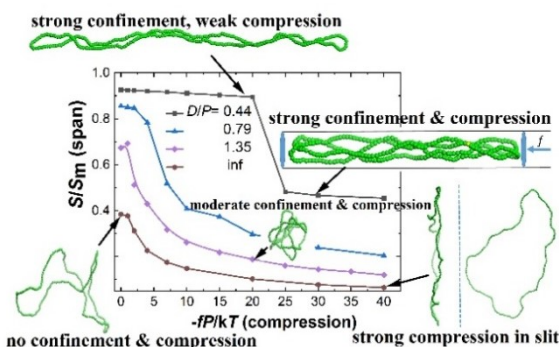
PISTON COMPRESSION OF SEMIFLEXIBLE RING POLYMERS IN CHANNELS

Peter Cifra¹, Tomáš Bleha¹

¹Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9,
Radlinského 9/1111, 84541 Bratislava,
cifra@savba.sk

We use molecular simulations in nanochannels to explore the compression elasticity of ring polymers of stiffness (persistence length) similar to DNA. By combination with the parallel data for linear polymers, we assess the effect of chain

topology on their compression behavior. The results show that the ring polymers are much less bendable at longitudinal compression than the linear analogs. The chain span of linear polymers is continuously reduced at compression, whereas in ring polymers an abrupt decrease of the span is observed. The simulation data elucidate this phenomenon as the buckling of a ring polymer into the double-folded hairpin. The shrinking ratio of sizes of the ring and linear chains shows a complex behavior much differing from the existing reports. The force-displacement functions for chains of both topologies at moderate confinement are very well accounted for by the mean-field Flory scheme. The theory predicts the difference in the mechanical stiffness of the ring and linear polymers in qualitative agreement with the simulation data. These findings are relevant to the compression behavior of semiflexible ring polymers under spatial constraints such as in nanofluidic experiments, disordered media, or cellular environment.



Obr. 1 Compression of semi-flexible ring macromolecules such as DNA in a channel by piston involves a pronounced transition in narrow channels in comparison to linear chains. Under the combined confinement/compression effect chain span is resolved into a pre-stretching by channel walls and the deformation by compression force. Ring polymers are considerably more elastically stiff at longitudinal compression than the linear analogs.

This work was supported by the Grant Nos. SRDA-15-0323 and VEGA 2/0102/20. Furthermore, the authors would like to acknowledge the contribution of the COST Action CA17139.

- [1] Bleha T., Cifra P., *J. Phys. Chem. B*, , 124, 9, 1691 (2020)
[2] Cifra P., Bleha T., *Macromol. Theory Simul.*, DOI: 10.1002/mats.202100027 (2021)

2P03**ŠTRUKTÚRNE KOMPLEXNÉ INTERMETALICKÉ FÁZY V SYSTÉME AL-PD-CO**

Ivona Černíčková¹, Libor Ďuriška¹, Marek Mihalkovič², Peter Švec, Sr.², Peter Švec^{2,3}, Pavol Priputen¹, Marián Drienovský¹, Jozef Janovec¹

¹Slovenská technická univerzita v Bratislave, Materiálovotechnologická fakulta so sídlom v Trnave, J. Bottu 25, 91724 Trnava, Slovenská republika, ivona.cernickova@stuba.sk

²Fyzikálny ústav SAV, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 84511 Bratislava, Slovenská republika

³Centrum pre využitie pokročilých materiálov SAV, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 84511 Bratislava, Slovenská republika

Objav kvázikryštálov v roku 1982 [1] znamenal obrat v poznatkoch o kryštalografii a upriamil pozornosť na kovové materiály s klastrovou štruktúrou a veľkou základnou bunkou. Medzi takéto fázy, nazývané aj ako štruktúrne komplexné intermetalické fázy (SCIP), patria tiež kvázikryštály (sú charakteristické nekonečne veľkou základnou bunkou, neraz s ikosaedrálnou symetriou) a kvázikryštalické aproximanty (ich základná bunka je opísateľná pomocou „klasickej“ kryštalografie, obsahuje však stovky až tisíce atómov) [2]. Z atómovej stavby kvázikryštálov vyplývajú zaujímavé kombinácie vlastností, ako napr. veľmi nízka tepelná vodivosť spojená s pomerne vysokou elektrickou rezistivitou alebo slabá zmáčavosť kvapalinami spojená s dobrou koróznou odolnosťou a vysokou tvrdosťou. Tieto vlastnosti predurčujú ich použitie najmä v oblasti povlakov, katalýzy, elektroniky a fotovoltiky [3].

Táto práca sa venuje štúdiu SCIP pozorovaných v zliatinách Al-Pd-Co v nerovnovážnom stave a v stave blízkom rovnovážnemu. Pri štúdiu bola využitá riadkovacia elektrónová mikroskopia (REM), energiovo-disperzná spektroskopia (EDX), rtg. difrakčná analýza (XRD), diferenčná termická analýza (DTA) a transmisná elektrónová mikroskopia (TEM). Výsledkom práce je štruktúrny popis fáz (najmä dekadonálneho kvázikryštalického aproximantu), popis ich termodynamickkej stability a popis oblastí ich výskytu pri rôznych teplotách na základe chemického zloženia.

Táto práca bola podporená Vedeckou grantovou agentúrou ministerstva školstva, vedy, výskumu a športu a Slovenskej akadémie vied – projekt VEGA 1/0330/18 a Agentúrou na podporu výskumu a vývoja

na základe Zmluvy č. APVV-20-0124 a Zmluvy č. APVV-15-0049.

- [1] Shechtman, D., Blech, I., Gratias, D., Cahn, J.W.: *Phys. Rev. Lett.* 53, 1951 (1984).
- [2] Dubois, J.M.: *J. Phys. Condens. Matter* 13, 7753 (2001).
- [3] Dubois, J.M.: *Chem. Soc. Rev.* 41, 6760 (2012).

2P04**MIKROŠTRUKTÚRA, FÁZOVÉ ZLOŽENIE A ELEKTROCHEMICKÁ AKTIVITA ZLIATIN NA BÁZE HLINÍKA**

Libor Ďuriška¹, Marián Palcut¹, Ivona Černíčková¹, Martin Sahul¹, Ľubomír Čaplovič¹, Jozef Janovec¹,

¹Slovenská technická univerzita v Bratislave, Materiálovotechnologická fakulta so sídlom v Trnave, J. Bottu 25, 91724 Trnava, Slovenská republika, libor.duriska@stuba.sk

Zliatiny na báze hliníka s nominálnym chemickým zložením približne Al-30 at.% TM (TM = jeden alebo viac prechodových kovov) možno zaradiť do skupiny materiálov nazývaných komplexné kovové zliatiny (CMA) [1]. Tieto binárne, ternárne alebo kvaternárne zliatiny obsahujú okrem klasických kryštalických fáz tiež štruktúrne komplexné intermetalické fázy (SCIP). SCIP majú zvyčajne klastrovú štruktúru a sú tvorené veľkými kryštalovými mriežkami obsahujúcimi stovky až tisíce atómov. Špecifickou skupinou sú kvázikryštály s nekonečne veľkou elementárnou bunkou. Vďaka nízkemu koeficientu trenia, dobrej koróznej odolnosti, tvrdosti a dobrým optickým vlastnostiam vyplývajúcim z komplexnej atómovej štruktúry sa ich použitie orientuje najmä do oblasti povlakov, elektroniky a fotovoltiky [2].

Cieľom tejto práce bolo štúdium mikroštruktúry, fázového zloženia a koróznej odolnosti dvoch zliatin zo systému Al-Pd-Co. Zliatiny boli pripravené oblúkovým tavením čistých prvkov v argónovej atmosfére. Následne boli v nerovnovážnom stave analyzované pomocou elektrónovej mikroskopie (REM, TEM), energiovo-disperznej spektroskopie (EDX) a rtg. difrakcie (XRD). Korózna odolnosť zliatin bola preskúmaná pomocou potenciodynamickej polarizácie. Z polarizačných kriviek boli Tafelovou extrapoláciou stanovené korózne potenciály a korózne prúdy. Následne boli vypočítané priemerné korózne rýchlosti. Mikroštruktúra po korózii bola študovaná pomocou REM/EDX a konfokálnej laserovej

skenovacej mikroskopie (CLSM). Korózne správanie jednotlivých zliatin bolo posúdené z hľadiska ich chemického zloženia a kryštálovej štruktúry.

Táto práca bola podporená Vedeckou grantovou agentúrou ministerstva školstva, vedy, výskumu a športu a Slovenskej akadémie vied – projekt VEGA 1/0330/18 a Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe Zmluvy č. APVV-20-0124 a Zmluvy č. APVV-15-0049.

- [1] Steurer, W.: *Z. Kristallogr.* 219, 391 (2004).
[2] Dubois, J.M.: *Chem. Soc. Rev.* 41, 6760 (2012).

2P05

UHLÍKOVÉ VLÁKNA DOPOVANÉ FOSFIDMI PRECHODNÝCH KOVŮ AKO KATÓDOVÉ KATALYZÁTORY PRE ELEKTROLYZÉRY

Alexandra Gubová¹, Renáta Oriňaková¹, Magdaléna Strečková², Ondrej Petruš²

¹ Katedra fyzikálnej chémie, Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta UPJŠ, Moyzesova 11, 041 54 Košice, alexandra.guboova@student.upjs.sk

² Inštitút materiálového výskumu, Slovenská akadémia vied, Watsonova 47, 040 01 Košice

Vyčerpatel'né zásoby fosílnych palív a dopyt po energii vedú k narastajúcemu záujmu o efektívne zariadenia pre premenu energie. Elektrolyzéry s protón-výmennou membránou sú výhodné najmä z dôvodu relatívne nízkej prevádzkovej teploty, dynamickej odozvy zaťaženia a svojej jednoduchosti [1]. Avšak pre sprístupnenie technológie rozkladu vody za účelom získavania vodíka je nevyhnutné nájsť účinné a cenovo dostupné katalyzátory, ktoré by fungovali ako náhrada, v súčasnosti najaktívnejších, drahých kovov. Nízko-nákladová výroba vodíka vyžaduje efektívnu katalýzu pomocou lacného, vysoko-aktívneho, neušľachtiteľného, ekologického a stabilného elektrokatalyzátora [2].

Fosfidy prechodných kovov (napr. Ni, Co, Fe) zabudované v uhlíkových pórovitých vláknach sú považované za sľubné katalyzátory reakcie vývoja vodíka vďaka nízkej výrobnéj cene, vysokej katalytickej aktivite a dobrej stabilite vo všetkých prostrediach. Na pochopenie ich výnimočnej aktivity a perspektívne reálne využitie bolo pozorované správanie sa týchto vzoriek vo forme tenkých pórovitých vrstiev priamo v PEM elektrolyzéri.

Vzorky boli pripravené spekaním elektrospinovaných uhlíkových vlákien dopovaných fosfidmi prechodných kovov vo forme tenkej

vrstvy s hrúbkou len niekoľko stoviek mikrometrov. Vzorky boli prvotne charakterizované v klasickom troj elektródovom zapojení. Následne bola táto vrstva použitá ako katódový katalyzátor pre PEM elektrolyzér s veľkosťou elektródovej plochy 16 cm². Oboma metódami bola potvrdená vysoká aktivita pripravených katalyzátorov.

Táto práca bola podporená projektom APVV-20-0299 Slovenskej agentúry pre podporu výskumu a vývoja a projektom VEGA 1/0095/21 Vedeckej grantovej agentúry Ministerstva školstva, vedy, výskumu a športu Slovenskej republiky.

- [1] J. Liu, D. Takeshi, K. Sasaki, S.M. Lyth, Platinum-decorated nitrogen-doped graphene foam electrocatalysts, *Fuel Cells* 14 (2014) 728–734
[2] Bayer, T., Selyanchyn, R., Fujikawa, S., Sasaki, K., & Lyth, S. M. (2017). Spray-painted graphene oxide membrane fuel cells. *Journal of Membrane Science*, 541, 347–357. doi:10.1016/j.memsci.2017.07.012

2P06

EFFECT OF SOLVENT ON CHARGE TRANSPORT IN SINGLE MOLECULE JUNCTIONS

Magdaléna Hromadová¹, Štěpánka Nováková Lachmanová¹, Viliam Kolivoška¹, Jakub Šebera¹, Jindřich Gasior¹, Grégory Dupeyre², Gábor Mészáros³, Philippe P. Lainé²

¹J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry of the Czech Academy of Sciences, Dolejškova 3, 18223 Prague, Czech Republic, hromadom@jh-inst.cas.cz

²University of Paris, Sorbonne Paris Cité, ITODYS, 5 rue Thomas Mann, 75013 Paris, France

³Institute of Materials and Environmental Chemistry, Research Centre for Natural Sciences, Eötvös Lóránd Research Network, Magyar tudósok körútja 2, 1117 Budapest, Hungary

Organic molecules with specialized charge transport properties can replace silicon-based technologies. In this context expanded pyridinium derivatives showed promise as molecular wires for molecular electronics.[1,2]

Presented work deals with single molecule conductance properties (see molecules 1 to 4 in [3]) in different solvents (water, ethanol/mesitylene, mesitylene) obtained by Scanning Tunneling Microscopy break junction technique. Statistical analysis provided single molecule conductance G and molecular junction (MJ) length. DFT combined with non-equilibrium Green's function formalism was used

to calculate transmission functions explicitly considering the solvent molecules.

Experimentally–obtained MJ length was shorter in mesitylene compared to aqueous environment for all studied molecules. G values decreased in both solvents from molecule **1** to **4**. The largest difference between solvent environments was observed for **1**, for which $\log G/G_0$ is -3.4 ± 0.5 in water and -4.1 ± 0.5 in ethanol/mesitylene mixture. DFT computations enabled to explain differences in G values by different MJ evolution. An impact of the solvent on the energy offset of charge transporting orbital was evaluated and the change in LUMO energy was a key parameter controlling the charge transport. The solvent effect on the work function of metallic contacts and the effect of adsorption (van der Waals interactions) on G values is elaborated.

Financial support by the Czech Science Foundation (21-13458S) and the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (Barrande project 8J21FR016) is gratefully acknowledged.

- [1] Kolivoška V., Valášek M., Gál M., Sokolová R., Bulíčková J., Pospíšil L., Mészáros G., Hromadová M.: *J. Phys. Chem. Lett.* **4**, 589 (2013).
- [2] Kolivoška V., Šebera J., Severa L., Mészáros G., Sokolová R., Gasiar J., Kocábová J., Hamill J. M., Pospíšil L., Hromadová M.: *ChemElectroChem* **6**, 5856 (2019).
- [3] Š. Nováková Lachmanová, V. Kolivoška, J. Šebera, J. Gasiar, G. Mészáros, G. Dupeyre, P. P. Lainé, M. Hromadová: *Angew. Chem. Int. Ed.* **60**, 4732 (2021).

2P07

STUDY OF WEAK NONSPECIFIC INTERACTIONS BETWEEN NATURAL AND SYNTHETIC SUBSTANCES WITH ISOTHERMAL TITRATION CALORIMETRY

Volodymyr Lobaz, Edyta Wawrzyńska, Kristyna Kolouchova, Monika Holubova, Martin Hruby

Institute of Macromolecular Chemistry CAS, Heyrovského náměstí 2, 162 06 Prague 6, Czech Republic, lobaz@imc.cas.cz

Isothermal titration calorimetry is used for the study of interactions between molecules or colloids accompanied with thermal effects. It allows direct determination of the affinity constant, reaction enthalpy and stoichiometry in one experiment. Although, this technique is robust and label-free, there are numerous

limitations, such as reaction rate, solubilities, concentrations and pH.

Weak nonspecific interactions are those with poorly defined stoichiometry and low affinity constant, making the interpretation of calorimetric data ambiguous. The combination of calorimetry with scattering or spectroscopy, is applied to identify the type and strength of the interactions.

Formation of interpolyelectrolyte complexes from lysozyme with polyanions in competitive binding conditions was studied with direct and replacement titrations and showed the increased binding strength in a row alginate, bovine serum albumin and heparin.

Study of early stages of amyloid formation from lysozyme, triggered with linear and globular polysaccharides, showed correlation between complexation of lysozyme with polysaccharide and amyloidogenicity. Both complexation and amyloidogenicity were enhanced by the modification of glycogen with hydrophobic residuals.

The bovine serum was titrated to various polyacrylamides to reveal the influence of serum proteins on cloud point in comparison with water and PBS.

Financial support from the Czech Science Foundation (grant # 19-01602S) is gratefully acknowledged.

2P08

ELEKTROCHEMICKÁ AKTIVITA KATÓDOVÉHO MATERIÁLU Z RECYKLOVANÝCH BATÉRIÍ

Veronika Niščáková¹, Dominika Capková¹, Andrea Straková Fedorková¹, Soňa Hatoková², Miroslav Čigaš², Štefan Hanigovský²

¹*Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Prírodovedecká fakulta, Katedra Fyzikálnej chémie, Moyzesova 11, 041 54, Košice*

²*Fecupral, Jilemnického 3578/2, 080 01, Prešov*

Komerčné lítium iónové batérie často obsahujú ťažké kovy ako kobalt, pretože najčastejšie využívanými materiálmi sú LiCoO₂, LiMn₂O₄ a LiNi_{1-x-y}Co_xMn_yO₂ (NCM), preto je recyklácia starých lítiových batérií veľmi žiaduca [1]. Aj v tejto práci bol použitý ako aktívny katódový materiál recyklovaný materiál zo starých batérií. Elektrifikácia je taktiež v dnešnej dobe na vzostupe a preto sa veľa pozornosti sústreďuje na vývoj nových katódových materiálov, pretože sú zodpovedné za celkovú kapacitu batérie [2]. NMC je sľubný a lacný alternatívny elektródový

materiál, pretože sa môže nabíjať pri vyššom potenciály vďaka prítomnosti Mn^{4+} , ktorý stabilizuje štruktúru a vykazuje tým vyššie kapacity [3]. NMC materiál je populárny katódový materiál, ktorý má často premenlivé zloženie jednotlivých pomerov prvkov z ktorých je zložený, čo ovplyvňuje jeho konečné vlastnosti [2].

V tejto práci sme pripravili katódový materiál, ktorý mal nasledovné zloženie 80% NMC (recyklované); 10% amorfný uhlík a 10% PVDF (polyvinylidén fluorid). Pripravenú elektródu sme otestovali rôznymi elektrochemickými meraniami ako je cyklická voltampérometria, galvanostatické cyklovanie. Keďže bol ako aktívny materiál využitý recyklovaný materiál z recyklovaných batérii, sú výsledky, ktoré vykazovala elektróda veľmi dobré a úpravou vzoriek je možné dosiahnuť zlepšenie výsledkov.

Táto publikácia vznikla vďaka podpore v rámci Operačného programu Integrovaná infraštruktúra pre projekt : Inovatívne riešenia pohonných, energetických a bezpečnostných komponentov dopravných prostriedkov, 313011V334, spolufinancovaný zo zdrojov Európskeho fondu regionálneho rozvoja a Slovenskou agentúrou na podporu výskumu a vývoja APVV-20-0138 a APVV-20-0111.

- [1] B. Huang, Z. Pan, X. Su, L. An, Recycling of lithium-ion batteries: Recent advances and perspectives, *J. Power Sources*. 399 (2018) 274–286.
<https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2018.07.116>.
- [2] C. Busà, M. Belekoukia, M.J. Lloveridge, The effects of ambient storage conditions on the structural and electrochemical properties of NMC-811 cathodes for Li-ion batteries, *Electrochim. Acta*. 366 (2021).
<https://doi.org/10.1016/j.electacta.2020.137358>.
- [3] N. Srivastava, S.K. Singh, H. Gupta, D. Meghni, R. Mishra, R.K. Tiwari, A. Patel, A. Tiwari, R.K. Singh, Electrochemical performance of Li-rich NMC cathode material using ionic liquid based blend polymer electrolyte for rechargeable Li-ion batteries, *J. Alloys Compd.* 843 (2020) 155615.
<https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2020.155615>.

2P09

CHARAKTERIZÁCIA MIKROMETEORITOV POMOCOU HMOTNOSTNEJ SPEKTROMETRIE

Nováková Justína¹, Valíček Michal², Buček Andrej³, Velič Dušan¹³, Jerigová Monika¹³

¹ Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava

² Ústav počítačového inžinierstva a aplikovanej informatiky, Fakulta informatiky a informačných technológií, Slovenská Technická Univerzita, Ilkovičova 2, 842 16 Bratislava

³ Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava

Dňa 13.9.2020 sa uskutočnil let stratosférického balóna KVÚI. Za účelom zberu prachových častíc veľkostí 10^2 μm . Tieto častice, zvané mikrometeority, sa do stratosféry Zeme dostávajú z vesmíru prostredníctvom Poynting-Robertsonovho odporu, ktorý ich po špirálovitých dráhach ťahá do stredu Slnecnej sústavy. Pritom sa môžu zachytiť v atmosfére Zeme. Keďže mikrometeority sú veľmi malé, aj veľmi riedky vzduch stačí na ich zabrzdenie a môžu prejsť cez atmosféru bez väčších chemických zmien. Tým sa líšia od meteorov, ktoré sa v dôsledku trenia s atómami atmosféry zahrievajú, a častokrát v atmosfére úplne zhoria. Mikrometeority preto predstavujú „nedotknuté“ vzorky z vesmíru.

Zber mikrometeoritov v stratosfére je náročnejší a menej efektívny ako pozemný zber. Ten sa uskutočňuje najčastejšie v polárnych oblastiach, a to najmä topením Antarktického ľadu a snehu. Avšak vzorky zozbierané na zemskom povrchu sú vždy zaťažené istou mierou zvetrávania. To u vzoriek zbieraných v stratosfére nepozorujeme.

Podarilo sa nám identifikovať päť častíc zozbieraných počas misie KVÚ I., ktoré majú morfológické vlastnosti zodpovedajúce mikrometeoritom. Ich charakterizácia hmotnostnou spektrometriou sekundárnych iónov a energo-disperznou spektroskopiou umožňuje zistiť ich chemické zloženie, odhadnúť ich minerálové zloženie a definitívne určiť, či ide o materiál mimozemského alebo pozemského pôvodu. Pokiaľ sú identifikované častice mikrometeoritmi, možno ich klasifikovať pomocou jestvujúcich tabuliek.

2P10 MIKROŠTRUKTÚRA, FÁZOVÉ ZLOŽENIE A ELEKTROCHEMICKÁ AKTIVITA VYSOKOENTROPICKÝCH ZLIATIN

Marián Palcut¹, Pavol Priputen¹, Imrich Czére²,
Karolína Dvorštiaková¹, Žaneta Gerhátová¹, Martin
Sahul¹

¹Slovenská technická univerzita v Bratislave,
Materiálovotechnologická fakulta so sídlom v Trnave,
J. Bottu 25, 91724 Trnava, Slovenská republika,
marian.palcut@stuba.sk

²Železničné opravovne a strojárne Zvolen, a.s.,
Môťovská cesta 259/11, 96003 Zvolen, Slovenská
republika

Vysokoentropické zliatiny sú novými kovovými materiálmi s vynikajúcimi mechanickými vlastnosťami a dobrou koróznou odolnosťou. Tieto zliatiny, známe pod skratkou HEA (High Entropy Alloys, [1]), možno definovať ako systémy pozostávajúce z minimálne piatich rôznych kovových prvkov v porovnateľnej koncentrácii. Zastúpenie jednotlivých prvkov v HEA je 5-35 atómových percent. Vysokoentropické zliatiny sú termodynamicky stabilné materiály, pričom najväčší stabilizačný účinok má vysoká hodnota konfiguračnej entropie. Vďaka vysokej neusporiadanosti systému dochádza ku vzniku zliatin s pomerne jednoduchou kryštálovou štruktúrou a unikátnymi vlastnosťami. Typicky sú v HEA obsiahnuté tuhé roztoky kovov s priestorovo centrovanou alebo plošne centrovanou kubickou mriežkou [2, 3]. To vedie ku zvýšenej pevnosti, tvrdosti a zároveň dobrej húževnatosti zliatin.

V tejto práci bola preštudovaná mikroštruktúra, fázové zloženie a korózna odolnosť šiestich vysokoentropických zliatin s chemickým zložením AlCoFeNiCu_x (x=0,6 až 3). Zliatiny boli pripravené oblúkovým tavením z čistých kovov v ochrannej atmosfére. Pripravené materiály boli tvorené dvoma štruktúrnymi zložkami, ktoré boli identifikované ako tuhé roztoky kovov s plošne centrovanou (FCC) a telesne centrovanou mriežkou (BCC). Podiel FCC stúpal s rastúcim obsahom medi v zliatine. Korózna odolnosť zliatin AlCoFeNiCu_x v stave po odliatí bola preskúmaná potenciodynamickou koróznou skúškou pri izbovej teplote. Pomocou Tafelovej extrapolácie polarizačných kriviek boli stanovené korózne potenciály a korózne prúdy pre každú vzorku. Na základe korózných prúdov boli vypočítané priemerné korózne rýchlosti. Na základe štúdia mikroštruktúry a chemického

zloženia zliatin po korózii bol navrhnutý reakčný mechanizmus.

Táto práca bola podporená Vedeckou grantovou agentúrou ministerstva školstva, vedy, výskumu a športu a Slovenskej akadémie vied – projekt VEGA 1/0330/18 a Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe Zmluvy č. APVV-20-0124.

- [1] YEH J.-W., CHEN S.-K., LIN S. J., GAN J.-Y., CHIN T.S., SHUN T.T., TSAU C.-H., CHANG S. Y. Nanostructured High-Entropy Alloys with Multiple Principal Elements: Novel Alloy Design Concepts and Outcomes. *Advanced Engineering Materials*, 2004, Vol. 5, pp. 299-303.
- [2] LI Z., ZHAO S., RITCHIE R. O., Meyers M. A. Mechanical properties of high-entropy alloys with emphasis on face-centered cubic alloys. *Progress in Materials Science*. 2019, Vol.102, pp.296-345.
- [3] TANG T., HUANG L., HE W., LIAW P. K.. Alloying and Processing Effects on the Aqueous Corrosion Behavior of High-Entropy Alloys . *Entropy*. 2014, Vol.16, pp. 895-911.

2P11 ŠTÚDIUM VPLYVU POLYMÉRNEHO POVLAKU NA DEGRADÁCIU BIOMATERIÁLOV NA BÁZE ŽELEZA

Martina Petráková¹, Renáta Oriňaková¹, Radka
Gorejová¹, Andrej Oriňak¹

¹Katedra fyzikálnej chémie, Ústav chemických vied,
Prírodovedecká fakulta UPJŠ v Košiciach, Moyzesova
11, 041 54 Košice, martina.petrakova@student.upjs.sk

U staršej populácie sú žiadané výkonné biomateriály na náhradu poškodených tvrdých tkanív, ako sú umelé kĺby, výplne kostí a zubné implantáty. [1]. Väčšina implantátov je tvorená kovmi, ktoré sa môžu v určitom množstve uvoľňovať v dôsledku korozívneho prostredia telesných tekutín. Preto môže byť povrch implantátov upravený pokrytím povrchu vhodným bioaktívnym materiálom, vyhovujúcim potrebám pacienta. Výber a proces nanášania povlakov je určený na základe spracovateľnosti materiálu a jeho fyzikálno-chemických vlastností. Takéto povlaky sa ukazujú ako výhodné, pretože by mohli vylepšiť proces trvalej implantácie ako aj znížiť potrebu opakovaných chirurgických zákrokov [2]. Za týmto účelom je možné do povlaku integrovať molekuly liečiva, čo umožňuje podávanie terapeutických dávok na cieľové miesta [3].

V tejto práci bol študovaný vplyv bioaktívneho polymérneho povlaku na degradačné vlastnosti Fe biomateriálov. Vzorky boli pripravené z prášku karbonylového železa (CIP) lisovaním za studena

do peliet s priemerom 12 mm pri 600 MPa. Lisované vzorky boli následne spekané pri 1120 °C v redukčnej atmosfére po dobu 1 hodiny. Povrch železných vzoriek (Fe) bol modifikovaný vrstvou polymérneho povlaku polyetylénglykolu (PEG). Časť vzoriek bola pokrytá polymérnou vrstvou PEG obsahujúcou gentamicín. Korózne vlastnosti povlakovaných a nepovlakovaných vzoriek boli študované metódou anodickej polarizácie v Hanksovom roztoku. Prídavkom polymérneho povlaku sa zmenili degradačné vlastnosti vzoriek.

Táto práca bola podporená projektami APVV-16-0029 a APVV-20-0278 Agentúrou na podporu výskumu a vývoja.

- [1] Kasuga, T.: *Metals for Biomedical Devices*. 10 (2010).
- [2] Priyadarshini, B., Rama, M., Chetan, Vijayalakshmi, U.: *Journal of Asian Ceramic Societies*. 7, 4 (2019).
- [3] Gimeno, M., Pinczowski, P., Pérez, M., Giorello, A., Martínez, M. Á., Santamaría, J., Arruebo, M., Luján, L.: *European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics*. 96 (2015).

2P12

EXPERIMENTÁLNE A VÝPOČTOVÉ MERANIA HETEROGÉNNEJ KATALYTICKEJ HYDROGENÁCIE OXIDU UHLIČITÉHO NA METANOL

Natália Podrojková¹, Renáta Oriňaková¹, Andrej Oriňak¹

¹*Katedra fyzikálnej chémie, Ústav chemických vied, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11, Košice, 04001, natalia.podrojkova@student.upjs.sk*

Nadmerné spaľovanie fosílnych palív spôsobuje neustály nárast koncentrácie CO₂ v atmosfére, čo vedie k zásadným zmenám svetového podnebia. CO₂ je taktiež vysoko chemicky stabilná molekula, ktorej rozklad vyžaduje značnú úpravu fyzikálnych podmienok. Zvýšenie produkcie a využívania biopalív môže ovplyvniť spotrebu fosílnych palív a vznik CO₂, pričom produkcia týchto biopalív môže byť dosiahnutá taktiež rozkladom CO₂ vhodným technologickým spôsobom. Medzi najvyužívanejší proces rozkladu CO₂ patrí heterogénna hydrogenácia, ktorá zabezpečuje dosiahnutie vysokého výťažku biopalív avšak vyžaduje vysoké teploty a najčastejšie používané katalyzátory v tejto reakcii na báze ZnO, Cu, a Al₂O₃ sa vyznačujú nízkou stabilitou a nízkou aktivitou v dôsledku tvorby vody a silného hydrofilného charakteru

Al₂O₃ [1-3]. Predkladaný príspevok je preto zameraný na nanokatalyzátory na báze ZnO, CuO a zvýšenia ich stability vhodnou úpravou a zmenou štruktúry. ZnO nanočastice boli pripravené solvotermálnou metódou a obalené CuO radiačným spôsobom. Pripravené nanočastice boli charakterizované metódami zahŕňajúc röntgenovú difrakciu (XRD) a transmisnú elektrónovú mikroskopiu (TEM). Nanokatalyzátory sa následne použili v heterogénnej hydrogenácii CO₂ na metanol, kde sa sledovalo množstvo vzniknutého metanolu a aktivita katalyzátora pri rozličných teplotách. Experimentálne výsledky sú doplnené výpočtovými simuláciami povrchu CuO a jeho reakcie s molekulou CO₂ a H₂ pre pochopenie reakčného mechanizmu s cieľom vylepšenia efektivity a účinnosti katalyzátora.

Táto práca je podporená Vedeckou grantovou agentúrou MŠVVaŠ SR a SAV [VEGA 1/0095/21], Vnútroštruktúrnym vedeckým grantovým systémom PF UPJŠ [VVGs-PF-2021-1783].

- [1] Galadima A. et al.: *Carbon Resources Conversion*. 3, 20 (2020).
- [2] Hu B., Guild C., Suib S. S.: *Journal of CO₂ Utilization*. 1, 6 (2013).
- [3] Shaharun S. et al.: *Sains Malaysiana* 47, 207, (2018).

2P13

SOL-GEL-BASED 2D PRINTED LUMINESCENT MATERIAL

M. Žitňan¹, M. Blaško¹, J. J. Velázquez¹, L. Müller², L. Wondraczek², D. Galusek^{1,3}

¹*FunGlass, Alexander Dubček University of Trenčín, Študentská 2, 91150 Trenčín, Slovakia*

²*Otto Schott Institute of Materials Research, Friedrich-Schiller-University Jena, Fraunhoferstrasse 6, D-07743 Jena, Germany*

³*Joint Glass Centre of the IIC SAS, TnUAD and FChPT STU, Študentská 2, 91150 Trenčín, Slovakia*

* *The corresponding author e-mail: michal.zitnan@tmuni.sk*

Keywords: inkjet printing, luminescent materials, ink formulation, sol-gel

Inkjet printing has recently attracted great interest due to its ability to precisely deposit functional materials with no contact on different types of substrates. We present a commercially available inkjet printer modified to a flat-bed design along to a novel sol-gel-based luminescent ink. The aim of the work was to develop an ink suitable for a multi-nozzle commodity printer head and to print microstructures on stiff substrates. The sol

composition was optimized in terms of suitable ink viscosity, surface tension and evaporation properties. The formulation, containing a small percentage of rare-earth elements, shows good jetting properties. Solvent-evaporation-induced gelation and adequate wetting of the deposited droplets on the receiving substrates played an important role in the stability of the printed structures. Accurate deposition of luminescent materials at the microscale with good adhesion to different substrates and their optical properties are promising for the further application fields including optoelectronics, energy, biotechnology and anti-counterfeiting.

Acknowledgments

This publication was created in the frame of the project Centre for Functional and Surface Functionalized Glass (CEGLASS), ITMS code 313011R453, operational program Research and innovation, co-funded from European Regional Development Fund. This research work has been supported by the Research Agency of the Ministry of Education, Science, Research and Sport of the Slovak Republic, by the project: Advancement and support of R&D for "Centre for diagnostics and quality testing of materials" in the domains of the RIS3 SK specialization, Acronym: CEDITEK II., ITMS2014+ code 313011W442.

2P14

THERMOPOWER AS AN INTRINSIC PROPERTY OF MOLECULAR JUNCTIONS: SUPPORTING RESULTS OF SIMULTANEOUS STUDY OF ELECTRIC AND THERMOELECTRIC PROPERTIES OF SELECTED MODEL MOLECULES

František Vavrek¹, Jakub Šebera², Olena Butsyk^{1,3}, Viliam Kolivoška¹, Štěpánka Nováková Lachmanová¹, Táňa Sebechlebská, Gábor Mészáros⁴, Magdaléna Hromadová¹

¹ J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry of the Czech Academy of Sciences, Dolejškova 3, 182 23 Prague 8, Czech Republic, frantisek.vavrek@jh-inst.cas.cz

² Institute of Organic Chemistry and Biochemistry of the Czech Academy of Sciences, Flemingovo náměstí 2, 160 00 Prague 6, Czech Republic

³ Institute of Physics of the Czech Academy of Sciences, Na Slovance 2, 182 21 Prague 8, Czech Republic

⁴ Department of Physical and Theoretical Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University in Bratislava, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 84215 Bratislava 4, Slovakia

⁵ Research Centre for Natural Sciences, Eötvös Lóránd Research Network, Magyar Tudósok krt. 2, H-1117 Budapest, Hungary

Organic electronics as one of the alternative concepts in development and fabrication of electronic components for modern computing devices aims on studying charge transfer and transport mechanisms in organic molecules [1] and potential application of specimen with suitable electric and thermoelectric properties. These are predominantly studied by measuring the electric conductance G and thermopower S of single molecules, mainly using methods based on break junction techniques [2]. In this work we present the results of our study performed on model molecules of 4,4'-bipyridine and 4,4'-diaminostilbene using new experimental method for simultaneous measurement of G and S based on modified setup of STM break junction technique. Values were obtained for two most probable molecular junction configurations for each molecule, resulting in distinct conductance values G_H (high) and G_L (low) and corresponding thermopower values. Despite of distinct conductance regimes of specific molecule represented by values G_H , G_L differing in orders of magnitude, we obtained $S(G_H) \approx S(G_L)$ for thermopower indicating that thermopower does not depend on molecular junction configuration, supporting the claim of molecular thermopower

being an intrinsic property of the junction [3]. Transmission function calculations for specific molecular junction configurations based on DFT combined with non-equilibrium Green's function supports this study.

[1] The authors acknowledge the financial support by the Czech Science Foundation (20-03691X and 21-13458S).

Hromadová M., Vavrek F.: *Curr. Opin. Electrochem.* 19, 63 (2020).

[2] Hromadová M., Kolivoška V.: *Studying the Electrical Properties of Single Molecules by Break Junction Techniques*. In *Encyclopedia of Interfacial Chemistry: Surface Science and Electrochemistry Vol. 5*, pp 271–280. Wandelt, K. Ed., Elsevier, 2018.

[3] Reddy P., Jang S.-Y., Segalman R. A., Majumdar A.: *Science* 315, 1568 (2007).

2P15 PHYSICO-CHEMICAL STUDY OF MULTI-RESPONSIVE PORPHYRIN-POLYMER CONJUGATES

Nadija Velychkivska,¹ Ondřej Sedláček,² Jonathan P. Hill³ and Jan Labuta³

¹*Institute of Macromolecular Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, Heyrovsky Sq. 2, 162 06 Prague 6, Czech Republic, velychkivska@imc.cas.cz*

²*Department of Physical and Macromolecular Chemistry, Faculty of Science, Charles University, Prague 2 128 40, Czech Republic*

³*International Center for Materials Nanoarchitectonics (WPI-MANA), National Institute for Materials Science (NIMS), 1-1 Namiki, Tsukuba, Ibaraki 305-0044, Japan*

Nowadays, biomedical and material science fields advance rapidly and reveal demand for new multi-responsive materials. These materials are complex systems and can be produced in many ways. Our approach is a conjunction of temperature-responsive polymers (e.g. PNIPAM) with porphyrin units. These conjugates show sensing responses to various stimuli, such as pH, temperature, metals, salts, or solvents, but mainly in organic media (chloroform, THF, DMF, etc.) [1-3]. To broaden applications and processibility in aqueous solution, star-shaped conjugates of porphyrin with four PNIPAM arms at the periphery were synthesized. Extensive physicochemical analysis using NMR, DSC, SAXS, DLS, UV-vis, and photoluminescence spectroscopy has been done. The conjugates phase separates in the range of 20-25 °C, and the phase separation temperature T_p depends on

PNIPAM chains length and concentration. Upon separation, the colour changes from red to turbid red and the morphology of nanostructures from high-aspect-ratio prolate spheroids to spheres. An acid addition triggers protonation of the porphyrin core accompanied by solution colour change from red to green. When methanol is added, the co-nonsolvency effects occur (Figure 1). The analysis shows that the water-soluble porphyrin-PNIPAM conjugates demonstrate a multi-responsive behaviour and can be potentially used as novel colorimetric detectors of pH, temperature or solvent composition.

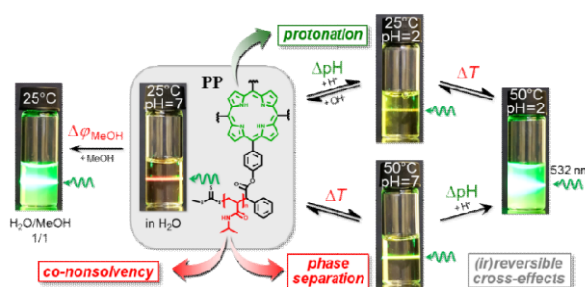


Figure 1. Schematic representation of multi-responsive effects present in aqueous solution of porphyrin-PNIPAM conjugates.

The authors acknowledge the support from the Czech Academy of Sciences (MSM200502102 project).

[1] Ishihara S., Labuta J., Šikorský T., Burda J. V., Okamoto N., Abe H., Ariga K. and Hill J. P.: *Chem. Commun.*, 48, 3933–3935 (2012).

[2] Hill J. P., Schumacher A. L., D'Souza F., Labuta J., Redshaw C., Elsegood M. R. J., Aoyagi M., Nakanishi T., Ariga K.: *Inorg. Chem.*, 45, 8288–8296 (2006).

[3] Yan Q., Jinying Y., Kang Y., Cai Z., Zhou L. and Yin Y.: *Chem. Commun.*, 46, 2781–2783 (2010)

2P16 BIODEGRADOVATEĽNÝ CELULÁRNÝ KOVOVÝ MATERIÁL MODIFIKOVANÝ POVLAKOM GLYCEROL CITRÁTU

Ján Macko¹, Tibor Sopčák², Radka Gorejová¹, Renáta Oriňaková¹, Andrej Oriňák¹

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

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

Jednou zo skupín materiálov patriacich k bioaktívnych biomateriálov sú biologicky degradovateľné materiály. Ich úlohou je dočasne poskytovať oporu postupne sa obnovujúcemu tkanivu *in vivo*. Na prípravu degradovateľných kovových celulárnych materiálov bolo použité

práškové železo práve kvôli svojim výhodným vlastnostiam. Celulárne materiály boli pripravené kombináciou replikačnej metódy a metód práškovej metalurgie. Pripravený celulárny materiál bol modifikovaný nanosením tenkej vrstvy prepolyméru glycerolcitrátu (GCA) metódou deep coatingu z etanolových roztokov s obsahom prepolyméru GCA 10% a 20%, ktorý sme nechali polymerizovať v peci pri teplotách 100°C, 135°C a 165°C 90 minút. V prípade roztoku s obsahom 10% GCA bola nanosená vrstva neúplná. V prípade 20% obsahu GCA bola nanosená vrstva zreteľne silnejšia. Korózne vlastnosti boli stanovované v Hanksovom roztoku formou statickej a dynamickej korózie. Najvyššiu rýchlosť degradácie mali vzorky pripravované z 10% roztoku GCA. Všetky pripravené vzorky korodovali rýchlejšie ako pôvodný materiál z čistého železa.

Táto práca vnikla za podpory grantov APVV-16-0029 a APVV-20-0278 Agentúry na podporu výskumu a vývoja a v rámci vedeckej spolupráce medzi SAV a MAV (projekt Low-temperature electrohydrodynamic techniques used for preparation of bioceramic coatings).

2P17 STRUKTURNÍ ZMĚNY MOLEKULÁRNÍCH TYČÍ PŘI PŘENOSU ELEKTRONU

Lubomír Pospíšil^{1,2}, Magdaléna Hromadová¹, Jiří Kaleta², Guillaume Bastien², Štěpánka Nováková¹, Jan Tarábek², Igor Rončević²

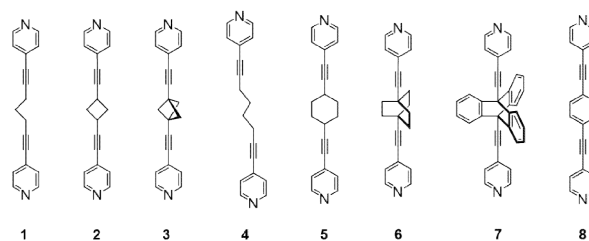
¹Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského, Dolejškova 3, 18223 Praha, lubomir.pospisil@jh-inst.cas.cz

²Ústav organické chemie a biochemie, Flemingovo nám. 2, 16000 Praha

Nově syntetizované látky s prodlouženou molekulární strukturou můžeme považovat za jakési "molekulární tyčinky". Jsou připraveny jako možné komponenty supramolekulárních látek, na př. molekulárních rotorů. Oba konce těchto molekul tvoří dvě skupiny 4-ethynylpyridinové. Koncové skupiny jsou odděleny alkylovým můstkem různých typů (Obr.1). Je to právě struktura těchto můstků, která určuje, zda tyčinka bude rigidní či zda bude ohebná. Výpočty strukturních konformerů ukazují na př. devět konformerů pro látku **1**. Potvrdili jsme, že elektrochemické metody umožňují určit, které deriváty jsou rigidní a které jsou flexibilní.

Elektrochemické vlastnosti **1** – **7** jsou určeny 4-ethynylpyridinovou skupinou. Potvrdili jsme, že

samotný 4-ethynylpyridin poskytuje první irreversibilní redukci při -2.1 V, odpovídající hydrogenaci trojné vazby. Další redukce téměř splyvá s rozkladem rozpouštědla, odpovídá redukci pyridinového kruhu a nastává při -2.7 V. Všechny studované látky jsou irreversibilně redukovány v okolí -2.1 V.



Obr. 1 Molekulární tyče s různými spojovacími můstky.

Stanovení počtu elektronů odhalilo překvapivou anomálii. Látka 4-ethynylpyridin se redukuje dvěma elektrony. Tyčinky se dvěma takovými skupinami přijímají čtyři elektrony. Výjimkou jsou **1** a **4**, které se redukují pouze dvěma elektrony. Spektroelektrochemická data a EPR signál těchto dvou výjimečných derivátů vedly k potvrzení flexibility, iniciované přenosem elektronu a působící vznik donor-akceptor interakcí s výraznou absorpcí ve viditelné oblasti.

Výzkum byl podporován Akademií věd České Republiky (RVO: 61388963 a 61388955) a Grantovou Agenturou ČR (20-13745S, 20-03691X a 21-13458S).

2P18 “NON-INNOCENT“ LIGANDY V NI- KOMPLEXOCH

Jozef Kožíšek¹

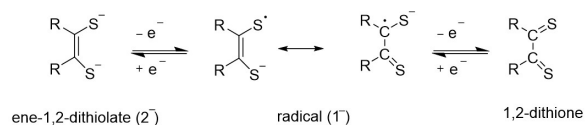
¹Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, Bratislava, SK-81107, Slovakia, jozef.kozisek@stuba.sk

Z veľmi presných röntgenových difrakčných dát sa študovala experimentálna elektrónová štruktúra komplexov (MePh₃P)₂[Ni^{II}(bdtCl₂)₂]. 2(CH₃)₂SO(**1**) a (MePh₃P)[Ni^{III}(bdtCl₂)₂](**2**), (bdtCl₂ - 3,6-dichlórbenzén-1,2-dithiolát). Ligand bdtCl₂(Obr. 1)patrí do skupiny „non-innocent“ ligandov.Sú toligandy, pri ktorých distribúcia elektrónovej hustoty medzi centrálnym atómom a ligandom je nejasná, čo okamžite vedie k otázke, ktorá oxidačná forma (zvyčajne neutrálna alebo aniónová)jeprítomná v komplexe). V takomto prípade experimentálne zistený náboj na centrálnom atóme je značne rozdielny s formálnym oxidačným stupňom.

Zo stechiometrie vyplýva, že v komplexe **(1)** sa centrálny atóm niklu nachádza v oxidačnom stupni II a v komplexe **(2)** v oxidačnom stupni III. Multipolárnym spresnením sa určilo rozdelenie elektrónovej hustoty a následnou AIM analýzou boli porovnané väzby v oboch komplexoch. Integráciou elektrónovej hustoty v atómovom bazéne sa zistili náboje jednotlivých atómov.

Teoretické výpočty pre experimentálnu geometriu priniesli pozoruhodnú zhodu. Tiež XANES experimenty na absorpčnej K-hrane niklu a síry a porovnanie s referenčnými zlúčeninami potvrdzujú vyššie percento Ni^{3+} v komplexe **(2)** ako v komplexe **(1)**. Rozdiel vo formálnom oxidačnom stave v komplexoch **(1)** a **(2)** nie je obmedzený na hustotu elektrónov v centrálnom atóme niklu a donorových atómoch síry - je

ovplyvnené rozložením elektrónovej hustoty v celom anióne.



Obr. 1 Ligand bdtCl_2 - „non-innocent“ ligand

Toto štúdium bolo podporené projektom VEGA 1/0718/19).

- [1] Machata, P., Herich, P., Lušpai K., Bučinský, L., Šoralová, S., Breza, M., Kožíšek, J. & Rapta, P. *Rev. Sci. Instrum.* 70, 3554 (2014).

PREDNÁŠKY - SEKCIA 3: ANORGANICKÁ A MATERIÁLOVÁ CHÉMIA

3P01

VPLYV GEOMETRIE KOORDINAČNÉHO POLYEDRA A NEKOVALENTNÝCH INTERAKCIÍ NA MAGNETIZMUS JEDNO- MOLEKULOVÝCH MAGNETOV

Radovan Herchel¹, Pavel Zoufalý¹, Kamil Kotrle¹,
Ivan Nemeč¹, Bohuslav Drahoš¹

¹Katedra anorganické chémie, Přírodovědecká fakulta,
Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12,
77900 Olomouc, radovan.herchel@upol.cz

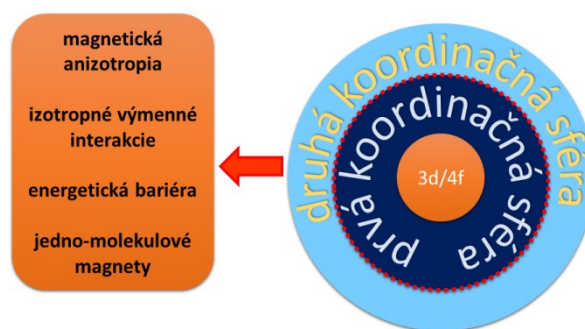
Prednáška sa bude venovať výskumu jedno-
molekulových magnetov, teda jednojadrových
alebo viacjadrových koordinačných zlúčenín,
ktoré sa chovajú ako nanomagnet, a vykazujú
pomalú relaxáciu magnetizácie pri nízkych
teplotách [1-3].

Budú prezentované výsledky získané pre
kobaltnaté komplexy, komplexy lantanoidov
a viacjadrové 3d-4f komplexy, pričom budú
diskutované možnosti ovplyvňovania magnetickej
anizotropie pre koordinačné geometrie s rôznym
koordinačným číslom.

Vplyv nekovalentných interakcií na magneticke
vlastnosti bude rozobraný pre neutrálne komplexy
ako aj kationové/aniónové kobaltnaté komplexy.

Na magneticke vlastnosti vplyvajú významne aj
výmenné interakcie medzi paramagnetickými
iónmi kovov mediované zväčša mostíkujúcimi
ligandmi. Diskutované budú prístupy zamerané
hlavne na kvantifikáciu 3d-4f interakcií.

Samotné štúdium magnetických vlastností bolo
podporené teoretickými výpočtami na báze teórie
funkcionálu hustoty (DFT) a takisto za využitia
multireferenčných metód akým je
CASSCF/NEVPT2.



Obr. 1 Schéma vzájomného pôsobenia štruktúrnych parametrov na magneticke vlastnosti jedno-molekulových magnetov.

Práca vznikla za podpory inštitucionálnych fondov katedry anorganické chémie PŘF UP v Olomouci a grantov IGA PŘF UP (2021_009, 2020_016 a 2019_009).

- [1] Herchel R., Zoufalý P., Nemeč I., *RSC Adv.* 9, 569 (2019).
- [2] Kotrle K., Herchel R., *Inorg. Chem.* 58, 14046 (2019).
- [3] Zahradníková E., Herchel R., Šalitrš I., Císařová I., Drahoš B., *Dalton Trans.* 49, 9057 (2020).

3P02

INTERACTION OF HASTELLOY-N AND HASTELLOY-G35 ALLOYS WITH VAPOURS GENERATED FROM MOLTEN FLINAK SALT

Ramu Ambati, Viliam Pavlik, Miroslav Boca

Slovak Academy of Sciences, Institute of inorganic
chemistry, Dubravska Cesta 9, 84536 Bratislava,
Slovakia. ambatiramu9@gmail.com

High-temperature corrosion study, for molten salt
reactors, is an essential step before the
commercialization of the reactor. The following
paper describes the results from the interaction of
vapours generated from FLiNaK salt with
Hastelloy-N and Hastelloy-G35 metallic alloys at
800°C for 48 hrs. The experiment discusses the
mass change, the surface morphology, elemental
distribution and cross-section analysis of the
corroded alloys. The result of the finding shows
that mass gain happens as a result of the
interaction. The surface morphologies of
Hastelloy-N were distinct in all three samples, in
Hastelloy-G35 all three samples had similar
morphologies and flaking of the surface. Mapping
shows that in sample “B” of Hastelloy-
N, “Mo” precipitates are formed on the surface
and in Hastelloy-G35 no precipitates are found.
The line scan shows that Fe and F might be

selectively reacting. The deposition pattern of “Na” is following the “F, Fe” deposition pattern in sample “B” of Hastelloy-N. In Hastelloy-G35 the “Cr” is reacting with “O₂” as a result of the presence of “O₂” contamination, as it has higher Gibbs free energy of formation. The Cross-section shows the “Cr” diffusion to the surface and forms a “Cr” rich layer in Hastelloy-G35.

Acknowledgements: This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-19-0270 and by the Scientific Grant Agency of the Ministry of Education of the Slovak Republic and the Slovak Academy of Sciences under no. 2/0024/20 and by Docketgrant APP0156, SAS

- [1] R.H. Banerjee, V. Singh, A. Arya, S. Banerjee, A comparative study of surface layer formation in Ni-based alloys with varying Cr contents exposed to high temperature fluoride environment, *Journal of Nuclear Materials*. 516 (2019) 54–62. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2019.01.001>.
- [2] K. Sridharan, T.R. Allen, *Corrosion in Molten Salts*, in: *Molten Salts Chemistry*, 2013. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-398538-5.00012-3>.
- [3] L.C. Olson, J.W. Ambrosek, K. Sridharan, M.H. Anderson, T.R. Allen, *Materials corrosion in molten LiF-NaF-KF salt*, *Journal of Fluorine Chemistry*. (2009). <https://doi.org/10.1016/j.jfluchem.2008.05.008>.

3P03 MECHANOCHEMICAL SYNTHESIS OF SULFIDES AS POTENTIAL THERMOELECTRIC MATERIALS

Peter Baláž¹, Matej Baláž¹, Marcela Achimovičová¹

¹Ústav geotechniky SAV, Watsonova 45, 04001 Košice, balaz@saske.sk

Mechanochemical synthesis is an efficient way of the preparation of chalcogenide-based nanoscale thermoelectric materials [1,2]. Due to the incorporation of structural disorder, defects and nanostructuring phenomenon as a result of high-energy ball milling, unique thermoelectric properties of the prepared products (after subsequent densification via, e.g., spark plasma sintering) can be achieved. Thermoelectric materials offer the viable way to generate electricity from a temperature gradient without hazardous side-products. In the present talk, the successful mechanochemical synthesis of selected sulfides (namely mawsonite Cu₆Fe₂SnS₈, tetrahedrite Cu₁₂Sb₄S₁₃ [3], chalcopyrite CuFeS₂ and mohite Cu₂SnS₃) in an industrial eccentric

vibration mill from elemental precursors will be demonstrated. These sulfides represent prospective thermoelectric materials due to high abundance of corresponding elements in Earth’s crust. The thermoelectric properties of the densified samples were measured using the standard methods for calculation of figure-of-merit ZT. This parameter combines the Seebeck coefficient and the electrical and thermal conductivity and determines the thermoelectric efficiency of material. In all the studied materials, the ZT values were comparable with the ones obtained by laboratory milling and other conventional synthetic methods. For example, the maximum ZT value in the case of mawsonite reached 0.51@623K due to very low lattice thermal conductivity.

This work was supported by the projects of the Slovak Grant Agency VEGA (2/0044/18) and the Slovak Research and Development Agency APVV (VV-18-0357).

- [1] Baláž, P., Baláž, M., Achimovičová, M., Bujňáková, Z., Dutková, E.: *J. Mater. Sci.* 52, 11851 (2017).
- [2] Baláž, P., Achimovičová, M., Baláž, M., Chen, K., Dobrozhan, O., Guilmeau, E., Hejtmánek, J., Knížek, K., Kubičková, L., Levinský, P., Puchý, V., Reece, M.J., Varga, P., Zhang, R.Z.: *ACS Sust. Chem. Eng.* 9, 2003 (2021).
- [3] Baláž, P., Guilmeau, E., Daneu, N., Dobrozhan, O., Baláž, M., Hegedus, M., Barbier, T., Achimovičová, M., Kaňuchová, M., Briančin, J.: *J. Eur. Ceram. Soc.* 40, 1922 (2020).

3P04 VPLYV HYDROTERMÁLNYCH PODMIENOK NA VLASTNOSTI CEMENTOVÝCH SPOJÍV

Eva Kuzielová^{1,2}, Zora Hajduchová¹, Matúš Žemlička²

¹Oddelenie anorganických materiálov, FCHPT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovensko.

²Ústav stavebníctva a architektúry, SAV, Dúbravská cesta 9, 845 03 Bratislava, Slovensko.

E-mail: zora.hajduchova@stuba.sk

Na cementové spojivá, ktoré v geotermálnych vrtoch vyplňajú priestor medzi pažnicami, t. j. oceľovými rúrami a stenou geotermálneho vrtu, sú kladené vysoké požiadavky. Musia odolávať vysokým teplotám, tlakom a kombinovanej chemickej korózii zapríčinennej zložením geotermálnej vody. Tieto faktory spôsobujú transformáciu primárnych hydratačných produktov na kryštalické fázy, karbonatizáciu a ďalšie degradačné reakcie, čo má za následok

zmenu pórovej štruktúry materiálu, následné zvýšenie priepustnosti a zhoršenie mechanických vlastností.

Cieľom práce bolo preskúmať vplyv teploty a tlaku na vývoj fázového zloženia, mikroštruktúru a pevnosť v tlaku viaczožkových cementových spojív v závislosti od ich počiatočného zloženia.

Cementové pasty boli pripravené čiastočným nahradením cementu triedy G puzolánovými prímiesami (kremičitým úletom, metakaolínom) a latentne hydraulickou jemne mletou granulovanou vysokopecnou troskou. Celková náhrada cementu predstavovala konštantných 30 hm. %, množstvo jednotlivých prímiesí v zmesiach sa menilo. Vzorky boli vystavené hydrotermálnym podmienkam (150 °C, 18 MPa), simulujúcim podmienky v reálnych vrtoch na Slovensku, po dobu 7 dní.

Vzorka bez prídavku prímiesí vykazovala najnižšiu pevnosť v tlaku a bolo v nej detegované značné množstvo nežiaducej kryštalickej fázy α -dikalciumsilikáthdrátu. Naopak, pri zvolených hydrotermálnych podmienkach sa jednoznačne prejavil priaznivý vplyv použitých prímiesí. Predovšetkým vplyvom reaktívnejšieho kremičitého úletu a metakaolínu sa vytvorilo väčšie množstvo tepelne stabilnejších produktov, ktoré nepodliehali nežiaducim transformáciám.

Táto práca vznikla za podpory Agentúry na podporu vedy a výskumu (APVV-19-0490) a Vedeckej grantovej agentúry VEGA (Projekt 2/0032/21).

3P05 SYNTHESIS AND MOLECULAR MAGNETISM IN PENTACOORDINATE CO (II) COMPLEXES WITH PENDANT ALKYL CHAINS

Jana Juráková,¹ Ján Pavlík,² Ján Moncol,² Petr Neugenbauer,¹ Denis Gentili,³ Massimiliano Cavallini,³ Ivan Šalitroš.^{1,2,4}

¹ Central European Institute of Technology, Brno University of Technology, Purkyňova 123, 61200 Brno Czech Republic

² Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Bratislava SK-81237, Slovakia. *e-mail: ivan.salitros@stuba.sk

³ Consiglio Nazionale delle Ricerche, Istituto per lo Studio dei Materiali Nanostrutturati (CNR-ISMN) Via P. Gobetti 101, 40129 Bologna, Italy.

⁴ Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, Palacký University, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, Czech Republic

Single molecule magnets (SMMs) are molecules showing the slow relaxation of magnetisation based on purely molecular origin. They illustrate the smallest possible magnetic storage devices, which can maintain information in single molecule. A good SMM exhibits a large effective anisotropy barrier U_{eff} and high value of relaxation time τ_0 [1].

First, ligands **L1** (2,6-bis(1-octyl-1*H*-benzimidazol-2-yl)pyridine) and **L2** (2,6-bis(1-dodecyl-1*H*-benzimidazol-2-yl)pyridine) were prepared and characterized. The preparation of ligands **L1** and **L2** was based on N-alkylation of imidazole rings of bzimpy. The main purpose of alkylation in this case was to increase the solubility of ligands and complexes in solvents such as CH_2Cl_2 or acetone, which is important for further deposition using lithography techniques. Then, four new pentacoordinate complexes expressed by general formula $[\text{Co}(\text{L1})\text{X}_2]$ ($\text{X} = \text{Cl}^-$ for **1** and Br^- for **2**) and $[\text{Co}(\text{L2})\text{X}_2]$ ($\text{X} = \text{Cl}^-$ for **3**, Br^- **4**) were prepared and characterized. The dynamic magnetic investigations of complexes revealed field induced SMM. Complexes **1** – **4** exhibit energy barrier U_{eff} in the range of 25 to 45 K and relaxation time τ_0 of the order of 10^{-7} s, which are values typical for Co(II) mononuclear complexes. The processability of compounds **1-4** was tested by lithographically controlled wetting and a versatile wet-lithography.

- [1] SLAGEREN, Introduction to Molecular Magnetism. Available from: <http://obelix.physik.uni-bielefeld.de/~schnack/molmag/material/123.pdf>

3P06
FERROCENOVÉ BIS-FOSFINY
OBSAHUJÍCÍ
FOSFATRIOXAADAMANTANOVOU
FUNKČNÍ SKUPINU: EFEKTIVNÍ
KATALYZÁTORY PRO C-H ARYLACI
BENZOXAZOLŮ

Filip Horký, Ivana Císařová, Petr Štěpnička

Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy, Albertov 6, 128 00 Praha 2, horkyf@natur.cuni.cz

Ke skupině úspěšných fosfinových ligandů v homogenní katalýze patří bezpochyby deriváty ferrocenu, jmenovitě především 1,1'-bis(difenylfosfino)ferrocen (dppf, schéma 1). Při výčtu vlastností dppf musí být zmíněna redoxní aktivita, chemická stabilita, dobrá rozpustnost v běžných organických rozpouštědlech, konformační flexibilita a hlavně katalytická aktivita tohoto ligandu s širokou škálou kovů na různých systémech. Krátce po objevení katalytické aktivity dppf začala práce na přípravě jejich derivátů, jež neustala do dnešního dne [1].

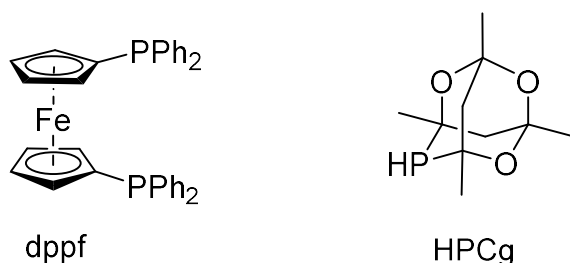


Schéma 1 1-1'-Bis(difenylfosfino)ferrocen (dppf) a fosfatritoxadaadamantan (HPCg).

V prezentované práci bude představena příprava nových ferrocenových fosfinů obsahující fosfatritoxadaadamantanovou funkční skupinu (HPCg, schéma 1). Tato na první pohled exotická skupina může být snadno připravena z levných chemikálií a vyniká specifickou rigidní strukturou, stabilitou a zároveň představuje neobvyklou kombinaci elektronové chudosti (srovnatelný s $P(OR)_2$) a sterické objemnosti (srovnatelné s $P(t-Bu)_2$) s malým C-P-C úhlem (blízký 90°). Výše zmíněné vlastnosti dělají skupinu atraktivní pro katalytické využití [2]. Katalytická aktivita definovaných palladium(0) komplexů s novými bis-fosfinovými ligandy byla testována v C-H arylaci benzoxazolů.

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury Univerzity Karlovy (projekt č. 920119).

- [1] Bandoli G., Dolmella, A.: *Coord. Chem. Rev.* 209, 161 (2000).
 [2] Downing J. H., Floure J., Heslop K., Haddow M. F., Hopewell J., Lusi M., Phetmung H., Orpen A. G., Pringle P. G., Pugh R. I., Zambrano-Williams D.: *Organometallics* 27, 3216 (2008).

3P07
MODIFIKACE OPTICKÝCH VLASTNOSTÍ
TENKÝCH VRSTEV
CHALKOGENIDOVÝCH SKEL
DEPONOVANÝCH METODOU SPIN-
COATING POMOCÍ DOPOVÁNÍ
VÝCHOZÍHO ROZTOKU

Jiří Jančálek¹, Stanislav Šlang¹, Michal Kurka¹, Karel Pálka^{1,2}, Miroslav Vlček¹

¹ Centrum materiálů a nanotechnologií, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Pardubice 532 10, Česká republika

²Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Pardubice 532 10, Česká republika
jiri.jancalek@upce.cz

Chalkogenidová skla a jejich tenké vrstvy jsou intenzivně studovány pro své výjimečné optické vlastnosti, jako jsou vysoké hodnoty indexu lomu či široká oblast propustnosti v IČ. Tenké vrstvy chalkogenidových skel jsou nejčastěji deponovány pomocí vakuových depozičních metod (např. napařování, naprašování či laserová ablace [1]). Alternativní cestou přípravy chalkogenidových tenkých vrstev je depozice z roztoků skel v těkavých bazických rozpouštědlech. Mezi tyto techniky řadíme např. spin-coating, dip-coating či elektro spray [1,2]. Depozice vrstev z roztoku umožňuje levnější přípravu, jelikož řada chalkogenidů může být deponována za atmosférických podmínek, stejně jako přípravu vrstev o složení, která často není možné připravit pomocí vakuových technik [1], či integrování dalších materiálů do skel pomocí dopování výchozího roztoku [2,3]. Hlavní nevýhodu těchto metod představuje inkorporace residuí rozpouštědla do struktury skla, kterou je ovšem možné výrazně redukovat pomocí vhodného post-depozičního teplotního režimu.

Tato práce se zabývala studiem možností cílené modifikace složení a tím i optických vlastností tenkých vrstev chalkogenidových skel deponovaných metodou spin-coating dopováním výchozího roztoku skel systémem As-S přidávkem síry nebo mísením tohoto výchozího roztoku skla

s roztokem jiného chalkogenidového skla. Všechny studované vzorky vykazovaly vysokou optickou kvalitou. Změny složení, struktury, tloušťky, optických vlastností, obsahu residuí či chemické odolnosti vrstev byly studovány v závislosti na složení a teplotní historii připravených vzorků.

Autoři děkují za finanční podporu z projektu " Senzory s vysokou citlivostí a materiály s nízkou hustotou na bázi polymerních nanokompozitů "-NANOMAT (CZ.02.1.01/0.0/0.0/17_048/0007376) a grantu LM2018103 poskytnutého Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy České republiky.

- [1] J. Orava, T. Kohoutek, T. Wagner, „Deposition techniques for chalcogenide thin films“, *Chalcogenide glasses*, Woodhead Publishing Limited (2014).
- [2] Ch.Li, S. Novak, S.A. Denisov, N.D. McClenaghan, N. Patel, A. Agarwal, K. Richardson, W. Deng, *Thin Solid Films* 626,194 (2017).
- [3] J.M.P. Almeida, E.C. Barbano, C.B. Arnold, L. Misoguti, C.R. Mendonca, *Opt. Mater. Express* 7(1), 93 (2017).

3P08 BIO-INSPIRED STRUCTURES BASED ON POLYMER GRAFTED GO: A TOOL TO UPGRADE EPOXY/CARBON FIBRE COMPOSITE.

Ivan Kelnar, Miroslav Janata

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

The well-known self-assembling ability of graphene oxide (GO) can be strengthened by its polymer-modifications. Numerous studies also indicate that suitable polymer/GO combinations may form “artificial” nacre with parameters exceeding this natural “gold standard” of rigid tough materials. Grafting or subsequent covalent linking of polymer chains can further improve performance of these systems. Our recent results show that both single and bimodal grafting of GO may lead to unique ordered structures in epoxy. Especially GO grafted with dissimilar polymer chains, moreover with various grafting geometry, possess specific self-assembling performance due to repulsive interactions between attached chains. We have also detected deposition this of self-assembled adduct on surface of carbon fibres. Due to excellent mechanical performance of nacre-like materials, this should lead to formation of rigid tough interface. Such a nanometer thick interlayer, necessary to enhance resistance against

delamination cracking in composites, is a radical alternative to other methods using soft interface, leading to critical reduction in stiffness. Presented results deal with effective electrophoretic coating of carbon fibres using polymer-grafted and especially in-situ dopamine-coated GO. Relationship between factors determining interface parameters (composition, thickness and type of polymer chain) and interlaminar shear stress of carbon fibre/epoxy composites is highlighted.

This work was supported by Czech Science Foundation (Grant No 19-06065S)

3P09 INVESTIGATION OF SELECTED LANTHANIDE TRIFLUORIDES IN MOLTEN EUTECTIC MIXTURE LiF-MgF₂

Blanka Kubíková¹, Jarmila Mlynáriková¹, Zuzana Netrová¹, Miroslav Boča¹

¹*Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, blanka.kubikova@gmail.com*

Application of light rare-earth elements and their compounds is widely increasing in the last three decades and covers the area of permanent magnets, phosphors, battery alloy, polishing powders, metallurgy and/or nuclear energy applications and the reprocessing of spent nuclear fuel.

All of previously mentioned applications are based on the knowledge of basic physicochemical properties of these systems. Presented work is focused on investigation of 3 molten systems containing lanthanide fluorides: SmF₃, GdF₃ and NdF₃ in molten (LiF-MgF₂)_{eut.} and the phase equilibrium and phase analysis, density and volume properties have been studied with the use of proper experimental techniques.

All investigated systems represent the cross sections of ternary systems. Therefore their phase diagrams consist of several crystallization fields. The results show similarities in behavior of investigated properties as well as some differences, especially in evaluation of XRD patterns of solidified samples and volume properties.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-19-0270 and by the Scientific Grant Agency of the Ministry of Education of the Slovak Republic and the Slovak Academy of Sciences under no. 2/0024/20.

3P10

DOPOVÁNÍ CHALKOGENIDOVÝCH VRSTEV SLOŽENÍ AS₃₃S₆₇ STŘÍBRNÝMI IONTY

Michal Kurka¹, Jiří Jančálek¹, Stanislav Šlang¹, Karel Pálka^{1,2}, Miroslav Vlček¹

¹Centrum materiálů a nanotechnologií, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 95, Pardubice 532 10, Česká Republika, michal.kurka@upce.cz

²Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 95, Pardubice 532 10, Česká Republika

Chalkogenidová skla jsou intenzivně studované polovodičové materiály zejména pro jejich optické vlastnosti, jako jsou vysoký index lomu a široká oblast propustnosti v infračervené spektrální oblasti. Tyto optické parametry, stejně jako chemickou odolnost chalkogenidových skel lze výrazně ovlivnit dopací stříbrnými ionty. Většina studií se zaměřuje na světlem nebo teplem indukovanou dopaci provedenou z tenké stříbrné vrstvy [1]. Další možnosti, jak provést dopaci je z roztoku stříbrných iontů [2].

V této práci byla studována možnost dopace tenkých vrstev chalkogenidového skla As₃₃S₆₇ stříbrnými ionty z roztoku dusičnanu stříbrného v dimethylsulfoxidu. Tento způsob dopace v kombinaci s přípravou tenkých vrstev metodou spin-coating umožňuje vynechat nákladné kroky zahrnující přípravu vrstev pomocí vakuových technik.

Byly porovnány vlastnosti dopovaných vrstev, které byly připraveny jak metodou vakuového napařování, tak metodou spin-coating. Dále byly diskutovány rozdíly v mechanismu dopace vakuově napařených a metodou spin-coating připravených tenkých vrstev a změny optických parametrů, topografie a dalších studovaných vlastností v závislosti na době dopace, respektive na koncentraci stříbra.

Autoři děkují za finanční podporu z projektu " Senzory s vysokou citlivostí a materiály s nízkou hustotou na bázi polymerních nanokompozitů "-NANOMAT (CZ.02.1.01/0.0/0.0/17_048/0007376) a grantu LM2018103 poskytnutého Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy České republiky.

[1] Wagner T., Zhang B., Fraenkl M., Valkova S., Vala R., Hrbek T.: Metal-Doped Chalcogenides In: The World Scientific Reference of Amorphous Materials Structure, Properties, Modeling and Main Applications Volume 1: Structure, Properties, Modeling and Applications of Amorphous Chalcogenides 593-649 (2021).

[2] Sakr G.B., Yahia I.S., El-Komy G.M., Salem A.M.: Surf. Coat. Technol. 205, 3443-3558 (2011).

3P11

SLOW RELAXATION OF MAGNETISATION IN MONONUCLEAR COBALT(II) COMPLEXES

Jana Juráková,¹ Barbora Brachňáková,² Ján Moncol', Ivan Šalitros'^{1,2,3}

¹ Central European Institute of Technology, Brno University of Technology, Purkyňova 123, 61200 Brno, Czech Republic

²Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Bratislava SK-81237, Slovakia, ivan.salitros@stuba.sk

³Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, Palacký University, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc,

Cobalt(II) transition metal complexes present exciting class of coordination compounds which quite often exhibit magnetic bistability based on the single molecule magnetism (SMM). This phenomenon exhibits reversible switching among the two projections of magnetization, which can be controlled at the molecular level using the magnetic field as an external trigger. With respect to this, such switches are excellent candidates for the data recording and for the utilization of high-density memory devices.

Herein we present family of mononuclear cobalt(II) complexes in which the structural investigation and magnetic studies have been performed [1]. Careful molecular design and goal-directed synthesis of tridentate aromatic N-donor ligands, derivatives of bis(benzimidazole-1-yl)pyridine [2], allowed the preparation of series of pentacoordinate cobalt(II)-SMM complexes, where the slow magnetic relaxation of magnetization was possible to control by the introduction of different substituents on the aromatic skeleton of tridentate ligands or by variation of the terminal ligand anions.

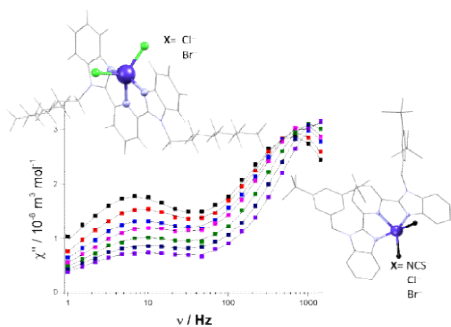


Fig. 1 Schematic view of mononuclear Co(II) single molecule magnets and their multichannel slow relaxation of magnetisation

Grant agencies (APVV-18-0197, APVV-18-0016, APVV-19-0087, VEGA 1/0125/18) are acknowledged for the financial support.

- [1] Brachňaková B. et al.: Dalton Trans. 49, 1249 (2020)
 [2] Brachňaková B. et al.: Dalton Trans. 49, 17786 (2020)

3P12

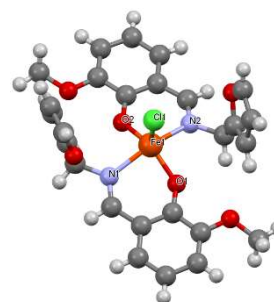
ŠTRUKTÚRNE A MAGNETICKÉ VLASTNOSTI KOMPLEXOV ŽELEZA OBSAHUJÚCE NOVÉ TYPY SCHIFFOVÝCH BÁZ

Terézia Lalahová¹, Ján Titiš¹, Cyril Rajnák¹, Roman Boča¹

¹Univerzita sv. Cyrila a Metoda v Trnave, Fakulta prírodných vied, 917 01 Trnava, Slovenská republika, terezia.lalahova@gmail.com

Boli pripravené a charakterizované nové *N,O*-donorové ligandy typu Schiffových báz (napr. $L^{Me} = 2-[(\text{Furán-2-ylmetylimino)-metyl]-6\text{-metoxy-fenol}$), ktoré boli následne použité na syntézu komplexov Fe(III), napr. $[\text{Fe}^{\text{III}}(\text{L}^{\text{Me}})_2\text{Cl}]$ **1**, $[\text{Fe}^{\text{III}}(\text{L}^{\text{Me}})_2\text{Br}]$ **2**. Komplexy boli charakterizované prvkovou analýzou (CHN), infračervenou a UV-vis spektroskopiou. Presná štruktúra zlúčenín sa určila pomocou monokryštálovej röntgenovej difraktometrie. Magnetické vlastnosti komplexov boli merané pomocou SQUID magnetometra v statickom (DC) aj dynamickom režime (AC). DC merania boli vykonané v RSO móde v malom poli ($B_{\text{DC}} = 0,1 \text{ T}$) a v teplotnom intervale 1,9 – 300 K. Namerané údaje boli detailne analyzované na úrovni teórie spinového Hamiltoniánu. Elektrónová štruktúra komplexov sa študovala využitím ab initio výpočtov. Merania AC susceptability potvrdili existenciu poľom indukovanej pomalej magnetickej relaxácie (SIM, „single-ion magnetism“) v pripravených komple-

xoch. V prípade ďalšej série pripravených komplexov Fe(III) sa študovala možnosť redukcie koordinovaných ligandov na amino formu za účelom aktivácie spinového prechodu.



Molekulová štruktúra komplexu **1**. [1]

Kľúčové slová: Schiffove bázy, Fe(III) komplexy, štiepenie v nulovom poli, AC susceptibilita, jednoiónový magnetizmus.

Podakovanie patrí slovenským grantovým agentúram a projektu APVV-19-0087 za finančnú podporu.

- [1] Rajnák, C.; Titiš, J.; Moncol, J.; Valigura, D.; Boča, R. Effect of distant Substituent to Slow Magnetic Relaxation of pentacoordinate Fe(III) complexes. Inorg. Chem. 2020, 59, 14871-14978.

3P13

TERNARY PHASES IN THE SYSTEMS $(\text{LiF-CaF}_2)_{\text{eut-X}}\{\text{LaF}_3, \text{NdF}_3, \text{SmF}_3, \text{GdF}_3\}$

Oksana Matselko¹, Jarmila Mlynáriková¹, Iveta Macková¹, Zuzana Netriová¹, Miroslav Boča¹

¹Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, oksana.matselko@savba.sk

Systems $\text{MF}/\text{MF}_2\text{-LnF}_3$ ($M = \text{Li-Cs, Mg-Ba, Ln} = \text{La-Lu}$) are attractive for the investigation due to their potential applications. In order to clarify the phase composition of the spontaneously cooled samples of the systems $(\text{LiF-CaF}_2)_{\text{eut-X}}\{\text{LaF}_3, \text{NdF}_3, \text{SmF}_3, \text{GdF}_3\}$ characterization by means of X-ray powder diffraction (XRPD) was performed. Experimental details were as reported in [1]. Crystallographic calculations were performed using the WinCSD program package [2].

In the system $(\text{LiF-CaF}_2)_{\text{eut-X}}\text{LaF}_3$ ($x = 0.05-0.3$) initial phases and impurity phase LaOF (structure type, ST, YOF) are crystallized; in the sample with $x = 0.1$, most probably, $\text{Ca}_x\text{La}_{1-x}\text{F}_{3-x}$ (ST HoH₃) is detected and, taking into account cell parameters, contains significantly higher amount of Ca than is reported ($\text{Ca}_{0.2}\text{La}_{0.8}\text{F}_{2.8}$). Systems $(\text{LiF-CaF}_2)_{\text{eut-X}}\{\text{NdF}_3, \text{SmF}_3, \text{GdF}_3\}$ ($x = 0.01-0.3$)

are characterized by crystallization of LiF and formation of cubic phases $\text{Ca}_{1-x}\text{Ln}_x\text{F}_{2+x}$ ($x \approx 0.2-0.35$ (Nd), $0.16-0.39$ (Sm), $0.17-0.32$ (Gd)) related to the ST CaF_2 (CeH₃ model was used) in the whole range, while CaF_2 is present only in the samples with $x = 0.01-0.1$, NdF_3 and SmF_3 – except $x = 0.01$, LiGdF_4 (ST $\text{Ca}[\text{WO}_4]$) – $x \geq 0.03$. Starting values for the compositions of the $\text{Ca}_{1-x}\text{Ln}_x\text{F}_{2+x}$ were calculated according to the cell parameters using equations presented in [3] and then refined.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-19-0270 and by the Scientific Grant Agency of the Ministry of Education of the Slovak Republic and the Slovak Academy of Sciences under no. 2/0024/20.

- [1] Boča M., Mlynáriková J., Macková I., Janičkovič D., Czimerová A., Zhong-ning S.: *Trans. Nonferrous Met. Soc. China* 31, 1151-1164 (2021).
- [2] Akselrud L., Grin Yu.: *J. Appl. Crystallogr.* 47, 803-805 (2014).
- [3] Sobolev B.P., Fedorov P.P.: *J. Less-Common Met.* 60, 33-46 (1978).

3P14

HĽADANIE FENOMÉNU SPIN-CROSSOVER V JEDNOJADROVÝCH Fe(III) KOMPLEXOCH TVORENÝCH IMINO ALEBO AMINO LIGANDMI

Romana Mičová¹, Cyril Rajnák¹, Ján Moncol², Ľubor Dlháň², Christoph Krüger³, Franz Renz³, Roman Boča¹, Milan Gembický⁴

¹Univerzita sv. Cyrila a Metoda v Trnave, Fakulta prírodných vied, Nám. J. Herdu 2, Trnava 917 01, romana.micova@gmail.com

²Oddelenie anorganickej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 2101/9, Bratislava, 812 38

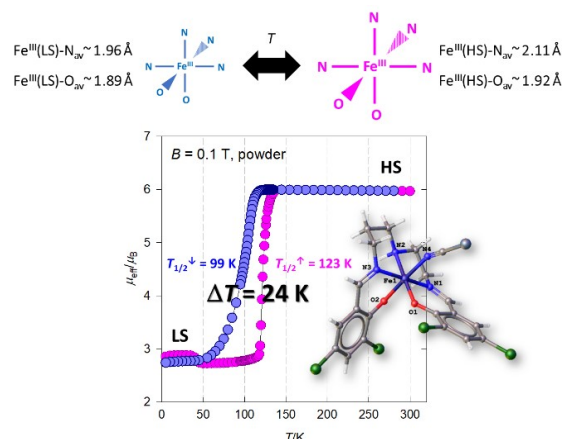
³Leibniz Universität Hannover, Institut für Anorganische Chemie, Callinstr. 9, D-30167 Hannover, Germany

⁴X-ray Crystallography Facility, UC San Diego, 5128 Urey Hall MC 0358, 9500 Gilman Drive, La Jolla CA 92093-0358, 858-822-3871

Jav spinového prechodu (angl. „spin crossover, SCO“) je definovaný ako zmena spinového stavu komplexných zlúčenín prechodných kovov na základe vonkajších podnetov (napr. tlak, teplota, elektromagnetické žiarenie). Pozorovaný bol v komplexoch s centrálnym atóm Fe(II), Fe(III) Co(II), Mn(II) a Mn(III). Komplexy železa(III) majúce oktaédrickú geometriu vykazujú spinový

prechod z nízko-spinového stavu $LS = 1/2$ do vysokospinového stavu $HS = 5/2$ [1-3].

V práci uvádzame štyri jednojadrové komplexy tvorené pentadentátnym ligandom imínového a aminového typu s halogenidovým/pseudohalogenidovým koligandom. Pentadentátny ligand, tzv. Schiffova báza bola nasyntetizovaná s použitím 3,5-dichlorosalicylaldehydu a triamínu a následne redukciou prevedená na amino formu. Ligandy sa miešali s hexahydrátom chloridu železitého. Pripravili sa oktaédricke komplexy so všeobecným vzorcom $[\text{Fe}^{\text{III}}(\text{L}^{\text{im}})(\text{X})]$ {kde X = Cl (1), NCSe (2)} a $[\text{Fe}^{\text{III}}(\text{L}^{\text{am}})(\text{X})]$ {kde X = Cl (3), NCSe (4)}. Charakterizované boli prvkovou analýzou, IČ spektroskopiou a UV-Vis spektrometriou. Kryštálové štruktúry komplexov boli určené monokryštálovou röntgenovou difrakciou. DC magnetické merania komplexu 2 potvrdili, že vykazuje teplotne indukovaný jav spinového prechodu s hysteréznou slučkou so šírkou $T = 24$ K (Obr. 1). Dĺžky väzieb medzi centrálnym atómom a donorovými atómami vo zvyšných komplexoch naznačujú vysokospinový stav Fe(III).



Obr. 1 Teplotne indukovaný jav spinového prechodu v komplexe 2.

Podakovanie patrí slovenským grantovým agentúram (APVV 16-0039, APVV 18-0016, VEGA 1/0013/18) spolu s DAAD(D/SK) projektom za finančnú podporu.

- [1] Rajnák C., Mičová R., Moncol J., Dlháň L., Krüger Ch., Renz F., Boča R.: *Dalton Transaction*, 50, 472 (2021).
- [2] Martinho P. N., Gildea B., Harris M., Lemma T., Naik A. D., Müller-Bunz H., Keyes T. E., Garcia Y., Morgan G.: *Angew. Chemie-Int. Ed.*, 51, 12597 (2012).
- [3] Schäfer B., Rajnák C., Šalitraš I., Fuhr O., Klar D., Schmitz-Antoniak C., Weschke E., Wende H., Ruben M.: *Chem. Commun.*, 49, 10986 (2013).

3P15 PRÍPRAVA, CHARAKTERIZÁCIA A ŠTÚDIUM BIOLOGICKEJ AKTIVITY MEĎNATÝCH KOMPLEXOV S NSAID A RÔZNYMI N-DONOROVÝMI LIGANDAMI

Milan Piroš¹, Ján Moncol¹, Jozef Švorec¹

¹Oddelenie anorganickej chémie, Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, milan.piros@stuba.sk

Veľa ochorení, ktoré ovplyvňujú ľudskú populáciu, spôsobuje nadmerná produkcia nežiadúcich radikálových častíc. Jedným z príkladov je tvorba superoxidového radikálu, ktorý vzniká jedoelektrónovou redukciou kyslíka. Jeho koncentráciu v ľudskom tele regulujú metaloenzyémy označované ako superoxidodismutázy (SOD). Tieto enzyémy obsahujú vo svojom aktívnom mieste kovový kofaktor, ktorý participuje na katalytickej disproporcionácii superoxidového radikálu na molekulový kyslík a peroxid vodíka, čím znižuje koncentráciu tohto potenciálne nebezpečného radikálu. Nízke koncentrácie prípadne malfunkcie SOD enzyémov spôsobujú rôzne chorobné stavy, pri ťažších prípadoch vedúce až k neurodegeneratívnym ochoreniam, ako napríklad amyotrofická laterálna skleróza či Parkinsonova choroba [1-3]. Jednou z potenciálnych možností, ako vychytávať superoxidový radikál, je použitie nízkomolekulových syntetických náhrad v podobe komplexov prechodných kovov. Tento príspevok bude venovaný príprave a charakterizácii jedno- a dvojjadrových meďnatých komplexov s derivátmi kyseliny antranilovej zo skupiny nesteroidných protizápalových liečiv (NSAID) a rôznymi N-donorovými ligandami. s ohľadom na ich schopnosť vychytávať superoxidový radikál. Štruktúru pripravených komplexov sme charakterizovali pomocou RTG štruktúrnej analýzy ako aj nepriamych spektroskopických metód a schopnosť pripravených zlúčenín vychytávať superoxidový radikál sme študovali spektrofotometricky prostredníctvom redukcie NBT farbiva superoxidom.

Tento príspevok vznikol s podporou grantov VEGA 1/0639/18, VEGA 1/0482/20 APVV-19-0087 a APVV-18-0016.

- [1] Sheng Y. et al: *Chem. reviews.* 114, 7 (2014).
[2] Banti N.C., Hadjikakou K.S.: *Eur. J. Inorg. Chem.* 2016, 19 (2016).
[3] Tolman B.W. et al.: *Chem. reviews.* 117, 3 (2017).

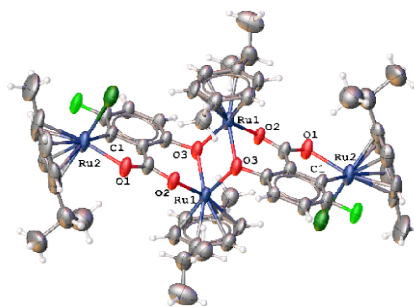
3P16 SYNTÉZA A KRYŠTÁLOVÁ ŠTRUKTÚRA NOVÝCH RUTENATÝCH KOORDINAČNÝCH ZLÚČENÍN S NSAID LIGANDAMI

Martin Schoeller¹, Ján Moncol¹

¹Oddelenie anorganickej chémie, Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, martin.schoeller@stuba.com

Rutenaté zlúčeniny sú dlhodobo objektom záujmu z hľadiska ich využitia ako nových cytostatických liečiv v terapii rakoviny. Hlavné dôvody výberu ruténia ako zaujímavého centrálného atómu sú: a) možnosť existencie minimálne v dvoch oxidačných stupňoch za fyziologických podmienok (+II/+III), b) komplexy sú kineticky inertné a majú rôzne rýchlostné konštanty vzhľadom na oxidačný stav c) možnosť napodobňovať ióny železa pri transportných dráhach [1-3].

Pripravené komplexy sa môžu rozdeliť do dvoch skupín. Prvú skupinu tvoria organokovové zlúčeniny s para-metylkuménom vykazujúce *angl.* Half Sandwich štruktúrny motív a druhú skupinu tvoria oktaédrické komplexy s N-donorovými ligandami. Na obrázku je zobrazená molekulová štruktúra rutenátého komplexu s 5-fluorsalicylátom, v ktorej sa pozoruje vznik novej väzby Ru-C(Ar) (Obr.1).



Obr. 1 Molekulová štruktúra komplexu $[Ru_4(p\text{-cymene})_4(5\text{-F-SA})_2Cl_2]$.

Tento príspevok vznikol s podporou grantov VEGA 1/0639/18, VEGA 1/0482/20 APVV-19-0087 a projektu ITMS kód 06240220084 „Univerzitný vedecký park STU Bratislava“ (Výskumný a rozvojový operačný program MŠVVaŠ Slovenskej republiky spolufinancovaný Európskym regionálnym a rozvojovým fondom).

- [1] Housecroft, E. C., Sharpe, G. A. (2005). Inorganic chemistry. Exxex: Pearson Education Limited.
 [2] Dabrowiak, J. C. (2017). Metals in Medicine. John Wiley & Sons.
 [3] Alessio, E. (2011). Bioinorganic Medicinal Chemistry. John Wiley & Sons.

3P17 UNDERESTIMATED CLASS OF COMPLEX OXIDES: ION MOVEMENT IN PYROXENES

Olha Skurikhina^{1,2}, Bernhard Gadermaier³, Marcela Achimovicova¹, H. Martin R. Wilkening³

¹Institute of Geotechnics, Slovak Academy of Sciences, Watsonova 45, 04001, Košice, skurikhina@saske.sk

²Faculty of Materials, Metallurgy and Recycling, Technical University of Košice, Letná 9, 04200, Košice

³Institute for Chemistry and Technology of Materials, Graz University of Technology, Stremayrgasse 9, 8010 Graz

The large compositional flexibility of pyroxenes renders them as interesting candidates for solid electrolytes as well as cathode active materials. However, the diffusion of small cations such as Na⁺ or Li⁺ in these complex oxides sensitively depends on the respective crystal structure and site occupation. In pyroxenes of the class, ABT₂O₆ represented by LiFeSi₂O₆, LiFeGe₂O₆ and NaFeGe₂O₆ the movement of Li⁺/Na⁺ ions is of low-dimensional character and hindered by high energy barriers of up to 0.8 eV [1]. In ATO₃ type pyroxenes such as LiVO₃, however, Li diffusion is characterized by the activation energy as low as 0.14 eV [2]. This large difference in activation energies is expected to arise from the different site occupation (see Figure 1). In ATO₃, the A element (Li⁺) occupies two different crystallographic sites, a tetrahedral (Li2) and an octahedral site (Li1) and forms a possible low-energy diffusion path. This pathway is blocked in ABT₂O₆ as the octahedral site is occupied by a transition metal. We complement these structural considerations by broadband impedance spectroscopic investigations in these pyroxenes to gain a deeper insight into the Li⁺ and Na⁺ diffusion.

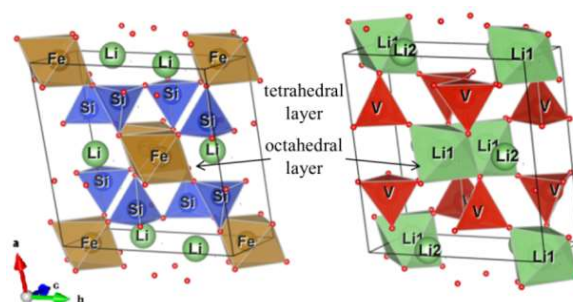


Fig. 1 Crystal structure of ABT₂O₆ (left) and ATO₃ (right).

Acknowledgment

The work was supported by Slovak Grant Agency VEGA 2/0103/20 and by Slovak Research and Development Agency APVV 19-0526. The research was conducted at the Technical University of Graz where the stay of PhD student Olha Skurikhina was funded through the program “Action Austria - Slovakia, Science and Education Cooperation”.

- [1] Kuhn, A., Tobschall, E., and Heitjans, P.: *Z. Phys. Chem.* 223, 1359-1377(2009).
 [2] Muller, C., Valmalette, J., Soubeyroux, J. L., Bouree, F., and Gavarrri, J., R.: *J. Solid State Chem.* 156, 379 (2001).

3P18 BIOLOGICKÉ ÚČINKY KOMPLEXOV STRIEBRA VO VZŤAHU K ICH ŠTRUKTÚRE

Zuzana Vargová¹, Michaela Rendošová¹, Gabriela Kuzderová¹

¹Katedra anorganickej chémie, ÚCHV PF UPJŠ, Moyzesova 11, 041 54 Košice, zuzana.vargova@upjs.sk

Dnešná situácia súvisiaca s pandémiou COVID-19 je dôkazom toho, že okrem závažných rakovinových ochorení je množstvo chorôb, ktoré každodenne ohrozujú naše zdravie a sú spôsobené mikroorganizmami. Všetky organizmy od baktérií až po cicavce, produkujú látky, ktorými sa bránia voči patogénom [1]. Prevažná väčšina z nich sú antimikrobiálne peptidy (AMP) s krátkymi aminokyselinovými sekvenciami, ktoré primárne pôsobia ako obrana proti širokému spektru patogénov [2]. Jednou z myšlienok ako imunitnému systému pomôcť v prípade akútnych infekčných stavov je spájať antimikrobiálne ióny kovov (Ag⁺, Zn²⁺, Cu²⁺) s efektívnymi organickými ligandami, ktoré sú svojou štruktúrou a vlastnosťami podobné antimikrobiálnym peptidom. Na základe toho sme sa v poslednom období zamerali na ligandy ako sú aminokyseliny alebo na ligandy, ktoré sú súčasťami bioštruktúr, napr. nikotínamid,

pyridínkarboxyláty. Zistili sme, že strieborné komplexy AgGly, AgAla a AgNam s iónovou štruktúrou vykazujú vyššiu AMB (antimikrobiálnu) aktivitu ako neutrálny komplex AgPhe, čo indikuje, že kationová časť štruktúry môže interagovať so záporne nabitými zložkami bunkovej membrány [3]. Zároveň sme zistili, že tieto iónové komplexy sú účinnejšie proti vybraným rakovinovým bunkám ako spomínaný neutrálny komplex. V príspevku budú prezentované antimikrobiálne a protirakovinové účinky vybraných komplexov striebra pripravených v našom laboratóriu so zameraním na vzťah medzi ich štruktúrou a biologickou aktivitou.

Podakovanie

Práca bola finančne podporená grantom UPJŠ (číslo grantu: VVGS 2020 1408).

- [1] Tornesello A.L., Borrelli A., Buonaguro L., Buonaguro F.M., Tornesello M.L. *Molecules* 25, 2850 (2020).
- [2] Raheem N., Straus, S.K. *Front. Microbiol.* 10, 2866 (2019).
- [3] Kuzderová G., Rendošová M., Gyepes R., Almaši M., Sabolová D., Vilková M., Olejníková P., Hudecová D., Kello M., Vargová Z. *J. Inorg. Biochem.* 210, 111170 (2020).

3P19

Fe(II) COMPLEXES WITH N-DONOR HETEROCYCLIC LIGANDS

Alexandra Šagátová¹, Jakub Orvoš², Ivan Šalitroš¹

Slovak University of Technology in Bratislava, Faculty of Chemical and Food Technology, ¹Department of Inorganic Chemistry, ²Department of Organic Chemistry, Radlinského 9, 812 37, Bratislava; sagatova.alexandra@gmail.com

Octahedral ferrous complexes $[\text{Fe}(\text{L}1)_3](\text{X})_2$, ($\text{L}1=2\text{-}\{4\text{-}[\text{trans-phenyldiazényle}]\text{pyridine-2-yl}\}\text{-1H-benzimidazole}$) can reach two different electron configurations of Fe(II) atoms (diamagnetic low spin (LS) and paramagnetic high spin (HS) state). The external stimuli such as temperature^[1] or light can be used for switching the electrons between t_{2g} and e_g energy levels of central atoms in the complexes with N-donor heterocyclic ligands. This effect is known as spin crossover (SCO). The first way of photoinduced SCO, the light induced-electron spin state trapping (LIESST or reverse-LIESST) is mostly achievable at cryogenic temperature. The metastable state of excited electrons with an increasing temperature are relaxed back by spin-orbital mechanism to the native singlet (LS) or quintet (HS) state, respectively. The second

ligand driven-light induced spin change (LD-LISC) is induced by reversible isomerization of photoactive ligand entities due to UV or VIS radiation. That causes a change of ligand-field energy, which is the reason of spin transition of Fe(II) atoms electrons.[2]

At 400 K, the $[\text{Fe}(\text{L}1)_3](\text{X})_2$ ($\text{X}=\text{BF}_4^-, \text{CF}_3\text{SO}_3^-, \text{ClO}_4^-$) complexes achieved nearly completed thermal SCO with gradual magnetic curve. The LIESST effect was induced at 5 K by green light (532 nm). The reversible *trans*↔*cis* isomerization of azophenyl entities of $[\text{Fe}(\text{L}1 \text{ or } \text{L}2)_3](\text{X})_2$ ($\text{L}2=2\text{-}\{5\text{-}[\text{trans-phenyldiazényle}]\text{pyridine-2-yl}\}\text{-1H-benzimidazole}$) complexes causes increasing or decreasing of characteristic absorption bands.

This project was supported by financial support from APVV-19-0087 project.

- [1] Sams J. R., Tsin T. B.: *Inorg. Chem.* 1544–1550 (1976).
- [2] Brachňakova B., Šalitroš I.: *Chem. pap.* 773–798 (2018)

3P20

HIERARCHICKY PORÉZNÍ UHLÍKATÉ MONOLITY

Václav Slovák, Tomáš Zelenka, Gabriela Zelenková, Eva Kinnertová, Lucie Kořená, Madhav Chavhan

Katedra chemie, Ostravská univerzita, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava, vaclav.slovak@osu.cz

Jednou z aktuálních vědeckých výzev v oblasti porézních uhlíkatých materiálů pro různé aplikace (katalýza, elektromobilita, adsorpce) je syntéza hierarchicky porézních (propojené póry různých velikostí) uhlíkatých monolitů (objektů větších než malých). Výhodou takových materiálů je na rozdíl od prášků snadná manipulovatelnost a separovatelnost a velmi dobrá dostupnost vnitřního povrchu právě díky hierarchické porozitě.

Relativně snadný způsob přípravy takových materiálů (založený na sol-gel kondenzaci resorcinolu s formaldehydem v přítomnosti surfaktantu) byl nedávno vyvinut na katedře chemie Ostravské univerzity, což otevřelo nové výzkumné možnosti. K pochopení samotného procesu přípravy je nutné sol-gel kondenzaci studovat kombinací různých technik (DSC, NMR relaxometrie, FTIR). Hierarchicky porézní monolitický uhlík pak představuje ideální platformu pro různé typy studií – od vývoje nových charakterizačních technik (termoporometrie), přes řešení kinetiky povrchové oxidace uhlíku, testování adsorpčních jevů

(plyny, roztoky), hledání možností povrchových úprav (zavedení heteroatomů) až po využití uhlíku jako nosiče katalyticky aktivních nanočástic (kovy, TiO_2). Dosud zcela nevyřešenou otázkou je pak možnost kontroly velikosti pórů v takových materiálech (zvláště mezopórů v rozmezí 10–50 nm).

3P21

CHARAKTERIZACE PORÉZNÍCH MATERIÁLŮ FYZISORPCÍ PLYNŮ – DŮLEŽITÉ EXPERIMENTÁLNÍ ASPEKTY

Tomáš Zelenka

Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita, 30. dubna 22, Ostrava, 702 00, tomas.zelenka@osu.cz

Fyzisorpce plynů (např. $\text{N}_2/77\text{ K}$, $\text{Ar}/87\text{ K}$, $\text{CO}_2/273\text{ K}$) je jednou z nejpoužívanějších technik pro charakterizaci texturních vlastností materiálů na úrovni mikroporozity (póry < 2 nm) a mezoporozity (2 – 50 nm). Navzdory dobré dostupnosti komerčních manometrických fyzisorpčních analyzátorů může být získání kvalitních adsorpčních a desorpčních problematické.

Príspevek je zaměřen na přehled vybraných experimentálních aspektů a postupů, které mohou silně ovlivnit kvalitu izoterem. Kromě optimálního množství vzorku použitého pro měření se jedná o volbu optimálních podmínek odplynění vzorku. Teplota nesmí být příliš vysoká, aby nenarušila strukturu adsorbentu. V případě jemných práškových materiálů může také během odplynění docházet k jejich nežádoucí elutriaci, existují ale postupy, kterými ji lze účinně potlačit. Objem adsorbovaného/desorbovaného plynu v každém bodě izotermy závisí na znalosti tzv. mrtvého objemu systému. Existuje několik způsobů, jak tento objem určit, ne všechny ovšem zaručují vysokou kvalitu získaných izoterem. Měření izoterem plynů pro charakterizaci porézní struktury materiálů je založeno na předpokladu dosažení adsorpční rovnováhy, jedná se tedy o další velmi důležitý experimentální aspekt. Pro získání kvalitních dat je potřeba v neposlední řadě zajistit také řádnou těsnost celého systému, stejně jako izotermické podmínky měření.

3P22

TERMICKÝ ROZKLAD AMONNÝCH SOLÍ POMOCÍ TG-MS

Gabriela Zelenková, Václav Slovák

Ostravská univerzita, Přírodovědecká fakulta, Katedra chemie, 30. dubna 22, 702 00, Ostrava, ČR gabriela.zelenkova@osu.cz

Pomocí kvantitativní TG-MS metody (termogravimetrie spojená s hmotnostním spektrometrem) byl zkoumán mechanismus rozkladu jednoduchých anorganických látek, konkrétně uhličitanu a dusičnanu amonného. Samotná metoda je založena na předpokladu lineární závislosti mezi množstvím uvolněných plynů a intenzitě MS signálu příslušných iontů. Pomocí kvantitativní TG-MS metody bylo možné kvantifikovat množství uvolněných plynných produktů během termického rozkladu sledovaných anorganických látek a odhadovat samotný mechanismus rozkladu.

Studované látky (15, 20 a 28 mg) byly zahřáty v inertní atmosféře Ar (40 ml min^{-1}) do $1000\text{ }^\circ\text{C}$, přičemž pomocí MS byly sledovány ionty plynných produktů dle teoretických rovnic rozkladu daných látek.

Na základě provedených experimentů bylo zjištěno, že uhličitán amonný se rozkládá v rámci jednoho kroku, který je spojen s uvolněním NH_3 , CO_2 a H_2O . Evaluací dat získaných z měření uhličitanu amonného bylo potvrzeno, že předpoklady TG-MS metody jsou platné a vypočtené složení (mol. %) studované látky je v dobrém souladu s teoretickými hodnotami. Mechanismus rozkladu dusičnanu amonného je komplikovaný a může zahrnovat řadu dílčích reakcí. V našem případě jsme dospěli k třem reakcím, přičemž bylo zjištěno, že samotný mechanismus termického rozkladu závisí i na hmotnosti dusičnanu amonného.

3P23

ISOKYANOFERROCEN A JEHO KARBENOVÉ KOMPLEXY

Petr Vosáhl¹, Michal Franc¹, Petr Harmach¹, Ivana Čísařová¹, Petr Štěpnička¹

¹Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy, Hlavova 2030/8, 128 43 Praha 2 vosahlop@natur.cuni.cz

Ferrocen letos slaví 70 let od svého objevení a během posledního půl století se prokázal jako užitečný stavební blok s unikátními stereoelktronickými vlastnostmi, vhodnými

například pro přípravu ligandů [1]. Většina takových ligandů, využívaných v reakcích katalyzovaných přechodnými kovy, obsahuje fosforové donorové atomy. V posledních letech však získávají stále významnější postavení karbenové ligandy, které se vyznačují širokou variabilitou postupů přípravy i rozsahem svých stérických a donor-akceptorových vlastností [2]. Tento příspěvek se zabývá přípravou ferrocenových karbenových ligandů z isokyanoferrocenu a jejich koordinančním chováním v komplexech s katalyticky významnými kovy – palladiem a zlatem.

Karbenové komplexy byly připraveny dvěma způsoby. První cesta využívala inserce isokyanoferrocenu do vazeb uhlík-kov a následné alkylace vzniklých imidoylových komplexů za vzniku karbenových komplexů Fischerova typu. Druhým postupem byla adice aminů na isonitrilové komplexy, která poskytla diaminokarbenové komplexy. Vzniklé sloučeniny byly strukturně charakterizovány pomocí difrakce rentgenového záření na monokrystalech a samozřejmě také běžnými analytickými metodami.

Tato práce vznikla za finanční podpory Grantové agentury Univerzity Karlovy (číslo grantu: 222120)

[1] Štěpnička P. (Ed.): *Ferrocenes: Ligands, Materials and Biomolecules*, John Wiley and Sons, Chichester. (2008).

[2] Huynh H. V.: *Chem. Rev.* 118, 9457 (2018).

3P24

SYNTHESIS AND COORDINATION BEHAVIOUR OF NEW FERROCENE A-AMINOBI(S(PHOSPHINE))

Michal Navrátil¹, Ivana Císařová¹, Petr Štěpnička¹

¹*Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Hlavova 2030/8, 128 43 Praha, stepnic@natur.cuni.cz*

α -Aminophosphines ligands combine amine and phosphine donor groups separated by a methylene moiety. Here we present a new addition to this group, *N,N*-bis((diphenylphosphino)methyl)-ferrocenylamine, $\text{FcN}(\text{CH}_2\text{PPh}_2)_2$ (Fc = ferrocenyl, Ph = phenyl). This compound was synthesized by condensation of ferrocenylamine with (diphenylphosphino)methanol under dynamic vacuum and the reaction provided the crystalline product in a very good yield (87%). To assess donor properties of the phosphine, the corresponding phosphine selenide was prepared.

Furthermore, coordination properties of this new ferrocene ligand were investigated. In total, ten complexes with group 10 and 11 metals were

prepared, in which the ferrocene ligand was coordinated via phosphine groups in four different modes. Although the amine moiety can also coordinate to a metal ion, no bond between metal ion and the amine group was observed.

All synthesized compounds were characterized by standard spectroscopic methods (NMR, IR, MS ESI) and elemental analysis. Majority of the compounds provided crystals suitable for X-ray structure analysis and was further studied by cyclic voltammetry.

This work was supported by Czech Science Foundation (project. No. 19-09334S)

3P25

KOMPLEXY KOVŮ PRI LIEČBE A DIAGNOSTIKE RAKOVINY

Ján Moncol¹

¹*Ústav anorganickej chémie, technológie a materialov, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, jan.moncol@stuba.sk*

Rakovina je jedno z najväznejších civilizačných ochorení v súčasnosti. Veľkú pomoc pri liečení niektorých druhov rakoviny bol náhodní objav cytotoxického účinku komplexu známeho pod názvom cisplatina a v súčasnosti je na zozname základných liekov Svetovej zdravotníckej organizácie. Okrem pozitívnych terapeutických účinkov má cisplatina aj mnoho vedľajších účinkov, preto sa v súčasnosti stále hľadajú ďalšie zlúčeniny kovov. Medzi ne možno spomenúť ďalšie zavedené metaloliečivá platiny s názvom oxaliplatina a karboplatina, a iné zlúčeniny platiny a iných prechodných kovov skúšobne podávané pacientom. Ďalšou možnosťou pomoci zlúčením kovov pri liečbe rakoviny je využitie ich fotochemického potenciálu pri fotodynamickej terapii. Pri diagnostike rakoviny a lokalizácii nádorov sa tiež ukazuje potenciál komplexov kovov.

Prednáška ukáže súčasný stav použitia komplexov prechodných kovov ako terapeutiká alebo diagnostiká pri liečbe rakoviny. V rámci prednášky budú ukázané príklady komplexov platiny, ruténia, paládia, irídia, a medi s protinádorovou aktivitou. Tieto komplexy sú používané alebo skúšané na chemoterapiu, fotodynamickú terapiu alebo fotoaktivovanú chemoterapiu. Ďalej budú poukázané príklady použitia komplexov kovov ako diagnostických látok na magnetickú rezonanciu. V rámci prednášky budú ukázané aj komplexy kovov s

využitím rádioaktívnych izotopov na použitie v rádioterapii a/alebo v rádiodiagnostike SPECT alebo PET.

Táto práca vznikla s finančným príspevkom slovenských vedeckých agentúr s číslom projektov: VEGA 1/0639/18 a APVV-19-0087.

PREDNÁŠKY - SEKCIA 4: ORGANICKÁ CHÉMIA

4P01 STEREOSELEKTÍVNA MANNICHOVA REAKCIA V SYNTÉZE β - AMINOKETÓNOV

Michaela Čierna¹, Oľga Caletková¹, Dušan Berkeš¹,
Pavol Jakubec¹

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

Mannichova reakcia je trojkomponentná reakcia, ktorá nevyvrátiteľne patrí k významným metódam pre tvorbu C-N a C-C väzieb v jednom kroku. Od jej objavenia v roku 1912 Karlom Mannichom je stále objektom rozsiahlych štúdií, pričom sa jej metodika enormne rozrástla a bola popísaná vo viacerých vedeckých prácach[1]. Produktmi Mannichovej reakcie sú Mannichove bázy (β -aminoketóny) alebo ich soli, ktoré sú zaujímavé z pohľadu možnosti prevedenia širokého spektra rôznych derivatizácií za získania: 1,3-aminoalkoholov, substituovaných karbonylových zlúčenín, Michaelovských akceptorov alebo β -laktámov.

Oblasťou nášho záujmu bolo štúdium reverzibility Mannichovej reakcie, ktorú je možné aplikovať pre uskutočnenie fascinujúcej kryštalizáciou-indukovanej diastereomériernej transformácie (CIDT) [2]. Kombinácia reverzibilnej Mannichovej reakcie s kryštalizáciou kontrolovanou epimerizáciou na labilnom stereogénnom centre umožňuje izoláciu želaných aromatických, alifatických a cyklických β -aminoketónov vo vysokej stereochemickej čistote a vysokom výťažku pomocou jednoduchšej filtrácie. Možnosť multigramového prevedenia s využitím komerčne dostupných východiskových látok a bez nutnosti separácie produktu kolónovou chromatografiou predurčuje metódu na aplikácie v priemysle [3].

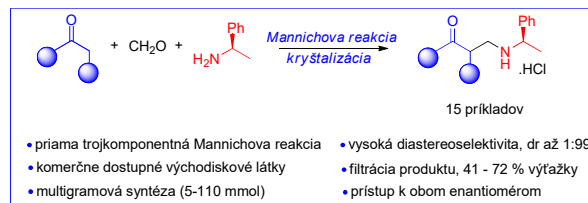


Schéma 1: Stereoselektívna príprava hydrochloridov β -aminoketónov

Príspevok vznikol za finančnej podpory Vedeckej grantovej agentúry MŠVVaŠ a SAV (VEGA 1/0489/19) a Agentúry na podporu výskumu a vývoja (APVV-20-0298).

- [1] Mannich, C.; Krosche, W. *Arch. Pharm.* **1912**, *250*, 647–667.
- [2] Kolarovič, A. and Jakubec, P.: *Adv. Synth. Catal.* **2021**, <https://doi.org/10.1002/adsc.202100473>
- [3] Čierna, M., Markus, J., Doháňošová, J., Moncol, J., Jakubec, P., Berkeš, D. and Caletková, O. *Eur. J. Org. Chem.* **2020**, 5685-5689.

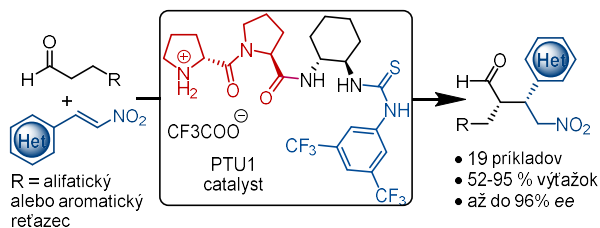
4P02 ASYMETRICKÁ MICHAELOVA ADÍCIA NA HETEROCYKLICKÉ NITROALKÉNY VYUŽÍVAJÚCA HYBRIDNÝ PEPTIDOMOČOVINOVÝ KATALYZÁTOR

Patricia Čmelová¹, Radovan Šebesta¹

¹ Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra organickej chémie, Ilkovičova 6, 841 04 Bratislava, cmelova4@uniba.sk

Nový bifunkčný peptidomočovínový katalyzátor kombinuje výhody krátkych peptidových katalyzátorov a chirálnych močovínových derivátov. Katalyzátor vďaka využívaniu kovalentnej a nekovalentnej aktivácie umožňuje vytvorenie enamínu z aldehydu pomocou (*R*)-prolinovej jednotky na *N*-konci peptidovej časti a zároveň aktivuje nitroalkénový substrát vodíkovými väzbami s tiomočovínovým fragmentom. Účinnosť hybridného katalyzátora sa otestovala na Michaelovej adícii rôznych aldehydov na synteticky zaujímavé heterocyklické nitroalkény [1]. Jeho využitie bolo vyskúšané nielen v podmienkach bez rozpúšťadla (s použitím guľového mlynu) ale aj v podmienkach s použitím rozpúšťadiel, pričom v porovnaní s mechanickým mletím v guľovom mlyne bol katalyzátor účinnejší v podmienkach v roztoku, čím poskytol Michaelove adukty obsahujúce rôzne heterocykly vo vysokých výťažkoch a enantiomérických nadbytkoch. Tieto adukty môžu byť následne derivatizované na biologicky veľmi zaujímavé 3,4-substituované pyrrolidíny.

Uskutočnené spektroskopické a DFT štúdie zároveň poskytli podstatný náhľad do štruktúry katalyzátora a jeho spôsobu fungovania v reakcii.



Ob. 1 Michaelova reakcia katalyzovaná peptidtio-močovninovým katalyzátorom.

Túto prácu podporila Slovenská agentúra pre výskum a vývoj na základe zmluvy č. APVV-18-0242.

- [1] Čmelová, P.; Vargová, D.; Šebesta, R. Hybrid Peptide-Thiourea Catalyst for Asymmetric Michael Additions of Aldehydes to Heterocyclic Nitroalkenes. *Journal of Organic Chemistry* 86 (2021) 581–592.

4P03

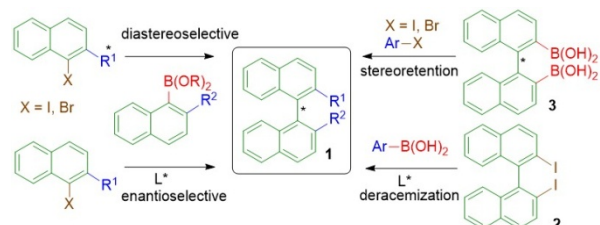
ACHIEVING STEREOCONTROL OF SUZUKI DIARYLATION AT POSITIONS 2,2' OF 1,1'-BINAPHTHYLS

Martin Putala, Filip Bulko

Comenius University, Faculty of Natural Sciences, Department of Organic Chemistry, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovakia, martin.putala@uniba.sk

Chiral binaphthyl scaffold appears in many biological active natural compounds, as a building block of modern materials or as useful ligands in asymmetric transformations. Despite the great attention paid to such derivatives, a preparation of enantiopure binaphthyl derivatives **1** bearing carbon groups at positions 2 and 2' moiety is still challenging. The simplest derivatives of this type can be prepared by enantio- or diastereoselective Suzuki coupling of two naphthyl units. Suzuki coupling of diiodide **2** is accompanied by almost complete racemization of the binaphthyl skeleton. We have shown that racemization can be suppressed by using an electron-poor ligand [1] or by polarity reversal of substrates – starting from diboronic acid **3** [2]. We have found that the stereolability of the binaphthyl skeleton during the Suzuki reaction can be explored for stereoinduction with a chiral ligand so that the preparation of diarylated derivatives **2** can proceed with deracemization [3]. We examined the influence of many factors on the stereoselectivity of this reaction. They include reaction temperature, Pd source, Pd to

ligand ratio, type of boronic acid derivative. Using BINAP as an effective chiral ligand, the stereochemical result has been shown to be significantly affected by the electronic and steric properties of the phenylboronic acid substituents. The corresponding diarylated binaphthyls **1** were thus prepared from racemic diiodide **2** in up to 82% yield and 98% ee.



- [1] Kasák P., Brath H., Dubovská M., Juríček M., Putala M.: *Tetrahedron Lett.* 45, 791 (2004).
 [2] Juríček M., Brath H., Kasák P., Putala M.: *J. Organomet. Chem.* 692, 5279 (2007).
 [3] Brath H., Mešková M., Putala M.: *Eur. J. Org. Chem.* 3315 (2009).

4P04

HYDRODEBROMACE POLYBROMOVANÝCH AROMATICKÝCH KONTAMINANTŮ KATALYZOVANÁ MĚDÍ ZA LABORATORNÍ TEPLoty A ATMOSFÉRIKÉHO TLAKU

Tomáš Weidlich¹, Barbora Kamenická¹, Petr Švec²

¹Skupina chemických technologií, Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice, Česká republika, tomas.weidlich@upce.cz

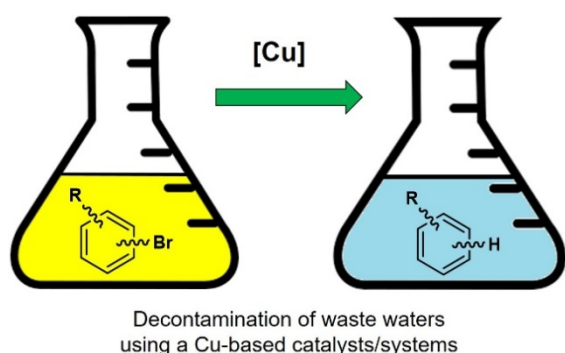
²Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice, Česká republika, petr.svec2@upce.cz

Měď patří do skupiny kovů průmyslově používaných jako hydrogenační katalyzátory. Je již dlouho známo, že měď a/nebo její sloučeniny katalyzují dehalogenační reakce, mezi nejznámější dehalogenační reakce aromatických halogenderivátů patří tzv. Ullmannova reakce. Ullmannova reakce však vyžaduje použití vysokých teplot a probíhá dobře v polárních aprotických rozpouštědlech, nejlépe s použitím aryljodidů nebo arylbromidů [1].

Na základě provedené literární rešerše a zkušeností s prováděním hydrodehalogenačních reakcí ve vodných roztocích jsme ověřovali vliv kovové mědi, slitin mědi s neušlechtilými kovy a dále jednoduchých sloučenin mědi za spolupůsobení

tetrahydridoboritanu sodného na průběh debromace vybraných polybromovaných fenolů, které díky své značné chemické stálosti mohou komplikovat recyklaci prováděnou v duchu principů tzv. cirkulární ekonomiky.

Prokázali jsme, že mezi nejúčinnější hydrodebromační činidla, která jsou velmi účinná i za laboratorní teploty a normálního tlaku v prostředí alkalického vodného roztoku, patří Devardova Al-Cu-Zn slitina a oxid měďný za spolupůsobení NaBH₄. Vedlejšími produkty těchto reakcí jsou biologicky mnohem lépe odbouratelné dehalogenované fenoly, snadno recyklovatelná měď, respektive její oxidy a příslušné hlinítky, respektive boritany, které je možné separovat srážením a využít jako suroviny např. při výrobě cementu [2,3].



Obr. 1 Schéma mědi katalyzované debromace polybromovaných fenolů.

Príspevek vznikl díky finanční podpoře skupin excelentního výzkumu Fakultou chemicko-technologickou, Univerzity Pardubice a díky projektu TA ČR TP01010012 - Rozvoj systému podpory projektů proof-of-concept na Univerzitě Pardubice, GAMA2-01/005.

- [1] Weidlich T.: *Catalysts*, 11(3), 1 (2021).
 [2] Weidlich, T.; Kamenická, B.; Beneš, L.; Čičmancová, V.; Komersová, A.; Čermák, J.; Švec, P.: *Catalysts* 11, 699, 2021.
 [3] Weidlich, T.; Kamenicka, B.; Melanova, K.; Cícmancova, V.; Komersova, A.; Cermak, J.: *Catalysts* 10, 994, 2020.

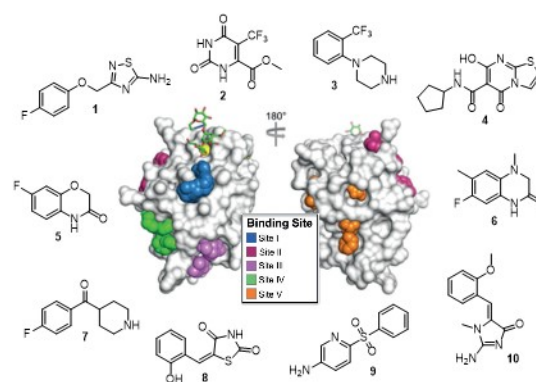
4P05 DRUG-LIKE LIGANDS FOR DC-SIGN RECEPTOR

Petra Ménová¹

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

DC-SIGN is a carbohydrate-binding receptor involved in a number of vital biological processes, such as cellular communication and

pathogen recognition. Although it is an attractive target for the modulation of immune reactions and inhibition of several viral infections, synthetic ligands that would act as either agonists or antagonists are scarce and based mostly on carbohydrates or glycomimetics that do not have drug-like properties. Recently, screening of a library of small non-carbohydrate molecules (fragments) has led to the identification of five secondary binding sites [1]. Our aim is to develop new non-carbohydrate drug-like DC-SIGN ligands that would interact with these secondary binding sites. For this purpose, we use the techniques of fragment-based drug discovery, in particular fragment growing and fragment linking.



I would like to thank the Max Planck Society and Institute of Organic Chemistry and Biochemistry CAS for financial support.

- [1] Aretz J. et al.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 56, 7292–7296 (2017).

4P06 SYNTÉZA 9-JODMETHYLADENINU A 8-^{[2]H}-9-JODMETHYLADENINU PRO STUDIÍ VZNIKU NEKANONICKÝCH NUKLEOVÝCH BAZÍ A NUKLEOSIDŮ PŘI IONIZACI DNA

Gabriela Nováková¹, Aleš Marek¹, František Tureček²

¹Laboratoř syntézy radioaktivně značených látek, Ústav organické chemie a biochemie, AV ČR, v.v.i., Flemingovo náměstí 542/2, 166 10 Praha 6, gabriela.novakova@uochb.cas.cz

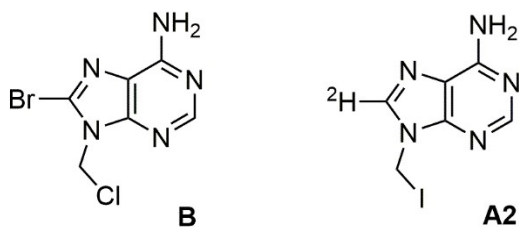
²Department of Chemistry, University of Washington, Bagley Hall, Box 351700, Seattle, WA 98195-1700, USA

Nukleové báze DNA představují chemicky stabilní heteroaromatické molekuly, které mají zásadní význam pro život na Zemi. Jejich ionizace pomocí vysokoenergetických částic nebo fotonů narušuje π-elektronový systém nukleové

báze a vytváří radikál kationy, ktoré môžu spouštět procesy vedoucí k poškození DNA. Ve snaze objasnit kinetiku a mechanismus těchto procesů – rychlých reakcí v důsledku přenosu náboje uvnitř DNA nebo s molekulami v okolí – se tomuto tématu věnuje řada experimentálních a teoretických studií [1].

Z důvodu omezení počtu teoretických protomerů při zachování neporušenosti π -elektronového systému nukleovýchází je vhodné využít pro aplikaci výpočetních metod či experimentálních studií kation radikálové spektroskopie v plynné fázi pouze zjednodušené modely nukleosidů. Ve spolupráci s prof. Turečkem byl pro studii tzv. nepolapitelných nekanonických isomerů zvolen modelový 9-methyladenin (A). K objasnění mechanismu ztráty vodíku z radikál kationu [A⁺.] byly syntetizovány deriváty 9-jodmethyladenin (A1) a 8-[2H]-9-jodmethyladenin (A2) [2].

V tomto příspěvku bude diskutována zejména překvapivě nesnadná příprava sloučeniny A2, která byla připravena pětikrokovou syntézou z adeninu. Vzhledem k tomu, že izotopová výměna vodíku (tzv. HIE) [3] u tohoto derivátu neposkytuje dostatečně stabilní značený produkt, byla zvolena strategie katalytické deuterobromace klíčového intermediátu (B) a reakční podmínky byly optimalizovány s ohledem na Br / Cl selektivitu.



Obr. 1 Klíčový meziprodukt (B) pro syntézu 8-[²H]-9-jodmethyladeninu (A2).

Tento příspěvek vznikl za podpory Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy (MŠMT, Grant INTER-EXCELLENCE LTAUSA19094) v rámci projektu Přenos elektronu a protonu v ionizovaných fragmentech DNA.

- [1] Yu C., O'Donnell T. J., LeBreton P. R.: *J. Phys. Chem.* 85, 3851 (1981).
- [2] Huang R. S., Nováková G., Marek A., Tureček F.: *J. Phys. Chem. A* 125, 338, (2021).
- [3] Voges R., Heys R. J., Moenius T.: *Preparation of Compounds Labelled with Tritium and Carbon-14*; John Wiley & Sons (2009).

4P07

3,6,9-TRISUBSTITUOVANÉ AKRIDÍNOVÉ DERIVÁTY A ICH DNA VÄZBOVÁ A BIOLOGICKÁ AKTIVITA

Mária Kožurková¹, Ladislav Janovec¹, Patrik Nunhart¹, Eva Konkoľová¹, Rastislav Jendželovský², Jana Vargová², Juraj Ševc², Mária Matejová¹, Beáta Miltáková¹, Peter Fedoročko²

¹Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta UPJŠ v Košiciach, Moyzesova 11, 041 80 Košice, maria.kozurkova@upjs.sk

²Ústav biologických a ekologických vied, Prírodovedecká fakulta UPJŠ v Košiciach, Moyzesova 11, 041 80 Košice

Väčšina v súčasnosti používaných chemoterapeutických protinádorových liečiv sú ligandy, ktoré interagujú s DNA duplexom tromi základnými spôsobmi: interkaláciou, väzbou do žliabkov DNA a kovalentnou väzbou. Jednou z dôležitých vlastností takýchto látok, v súvislosti s protinádorovou aktivitou, je schopnosť tvorby hydrofóbných interakcií. Ligandy ktoré sa interkalujú do DNA vykazujú cytotoxickú aktivitu voči nádorovým bunkám, ktorá spočíva v zabránení relaxácie DNA, blokovaní gémovej expresie a inhibícii replikácie DNA [1]. Medzi takéto látky patria aj deriváty akridínu. Ich rozsiahle biologické vlastnosti už desaťročia inšpirujú chemikov k derivatizácii akridínového skeletu s cieľom zvýšiť ich biologickú účinnosť a znížiť vedľajšie účinky. Akridínové jadro je kvôli jeho kompatibilitě s biologickými systémami a schopnosťou interagovať s biomolekulami v súčasnosti privilegovaným syntónom a dôležitou východiskovou štruktúrou pre vývoj nových moderných liečiv [2]. Topoizomerázy sú enzýmy vyskytujúce sa v jadre bunky, ktoré menia topológiou DNA [3]; ich úloha pri liečbe nádorových ochorení je stále predmetom intenzívneho výskumu. Topoizomeráza I a II sú vhodnými cieľmi v protinádorovej terapii a stali sa výzvou pre dizajn a syntézu nových inhibítorov topoizomeráz ako liečiv na rôzne typy nádorových ochorení. Táto prednáška je zameraná na štúdium nových 3,6,9-trisubstituovaných akridínových derivátov, určenie spôsobu ich interakcie s DNA a ich biologickej aktivity.

Táto práca vznikla za podpory VEGA 1/0016/18.

- [1] Liang, X. et al.: *Eur. J. Med. Chem.*, 1, 171, 129 (2019).
- [2] Nunhart, P. et al.: *Bioorg. Chem.*, 97, 103393 (2020).

- [3] Delgado, J. L., Hsieh, C.-M., Chan, N.-L. & Hiasa, H.: *Biochem. J.*, 23, 373 (2018).

4P08

GRADIENT COPOLYMERS FROM ALIPHATIC AND AROMATIC 2-OXAZOLINES WITH DIFFERENT ARCHITECTURE AS ADVANCED DRUG DELIVERY SYSTEMS

Juraj Kronek¹, Rushita Shah², Zuzana Kroneková¹, Veronika Huntošová³, Shubhashis Datta³, Daniel Jancura³, Pavol Miškovský³

¹Department for Biomaterials Research, Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, Slovak Republic, juraj.kronek@gmail.com

²Centre for Advanced Materials Application of the Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 11, Bratislava, Slovak Republic

³Center for Interdisciplinary Biosciences, Technology and Innovation Park, P. J. Šafárik University in Košice, Jesenná 5, 041 54 Košice, Slovak Republic

Gradient copolymers represent a promising alternative to block copolymers for the formation of micellar nanoparticles, since they are able to self-assemble in aqueous solutions [1]. Poly(2-oxazolines) prepared via living cationic ring-opening polymerization (LCROP) have been recognized as promising biomaterials for different biomedical applications [2]. Recently, gradient copolymers by LCROP of 2-ethyl-2-oxazoline and 2-(4-dodecyloxyphenyl)-2-oxazoline was used for the preparation of highly stable nanoparticles for encapsulation of curcumin [3].

In this contribution, we compared gradient copolymers with different hydrophilic and lipophilic 2-oxazolines, different molar fractions of both types of monomers, and different architecture. We showed that gradient copolymers containing 2-methyl- or 2-ethyl-2-oxazoline as hydrophilic block and 2-(4-alkyloxyphenyl)-2-oxazolines as lipophilic monomers can lead to efficient delivery systems for different hydrophobic drugs such as curcumin or hypericin. Beside more common quasi AB type gradient copolymers, we prepared for the first time digradient copolymers based on 2-oxazoline polymerization. Prepared digradient copolymers consist of one hydrophilic block and two lipophilic blocks and can consider them as BAB type copolymers. Such architecture can lead to the formation of stable nanoparticles with extraordinary high loading capacity for rifampicin

as antituberculosic drug recently successfully used also for the treatment of COVID-19.

Authors are thankful to the Slovak Grant Agency VEGA for financial support in the project Nr. 2/0172/21 and Slovak Research and Development Agency (SRDA) for financial support in the projects Nr. APVV-19-0487 and APVV-20-0202. This study was performed during the implementation of the project Building-up Centre for advanced materials application of the Slovak Academy of Sciences, ITMS project code 313021T081 supported by Research & Innovation Operational Program funded by the ERDF.

- [1] Alam M., Jack K.S., Hil D.J.T., Whitaker A., Peng H.: *Eur. Polym. J.*, 119, 394 (2019)
- [2] Lorson T., Lübtow M.M., Wegener E., Haider M.S., Borova S., Nahm D., Jordan R., Sokolski-Papkov M., Kabanov A.V., Luxenhofer R.: *Biomaterials*. 178, 204 (2018)
- [3] Datta S., Jutková A., Šrámková P., Lenkavská L., Huntošová V., Chorvát D., Miškovský P., Jancura D., Kronek J.: *Biomacromolecules*. 19, 2459 (2018)

4P09

RATIONAL DESIGN OF TETRAZINES FOR BIOORTHOGONAL CHEMISTRY

Michal Májek¹, Matej Trtúšek¹

¹Katedra organickej chémie, Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava 4, michal.majek@uniba.sk

Biological environment is quite hostile to most of the typical organic reactions – the presence of water, air and strong nucleophiles (-SH, -NH₂) would lead to a plethora of unwanted reactions if this was attempted. On the other hand, having a selective method of functionalization of biomolecules in real time would open new avenues in the study of living matter. Bioorthogonal chemistry strives to fulfill this niche by providing robust and fast reactions, which are compatible with biological environment [1]. An especially promising group of reactions for these applications is an inverse electron demand Diels-Alder reaction of tetrazines and strained alkenes/alkynes [3].

Two important properties need to be optimized, in order to design superior tetrazines for bioorthogonal applications – their rate of reaction with strained alkenes needs to be high, while their rate of reaction with nucleophiles, especially thiols, needs to remain low. We have devised a computational study to optimize these parameters, and attempted to explain the observed trends by means of DFT calculations. A small

library of substituted tetrazines was screened (Fig. 1), leading to discovery of new promising structures that will be synthesized.

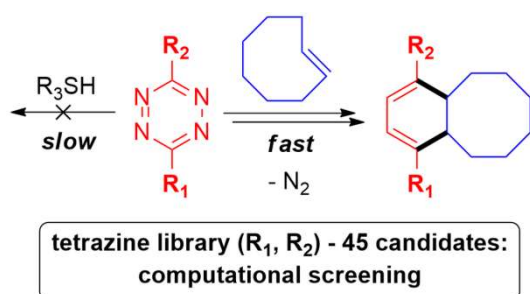


Fig. 1: Computational screening of substituted tetrazine library.

Acknowledgment: This work has been supported by VEGA grant no. 1/0633/21.

- [1] Sletten E. M., Bertozzi C. R.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 48, 6974 (2009).
- [2] Scinto S. L., Bilodeau D. A., Hincapie R., Lee W., Nguyen S. S., Xu M., am Ende C. W., Finn M. G., Lang K., Lin Q., Pezacki J. P., Prescher J. A., Robillard M. S., Fox J. M.: *Nat. Rev. Meth. Primers* 1, 30 (2021).
- [3] Seckute J., Devaraj N. K.: *Curr. Opin. Chem. Biol.* 17, 761 (2013).

4P10 NOVEL PHOTOISOMERISABLE LIGANDS FOR SPIN-CROSSOVER COMPLEXES

Jakub Orvoš¹, Róbert Fischer¹, Barbora Brachňaková², Ivan Šalitroš²

¹*Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovak Republic, jakuborvos@gmail.com*

²*Institute of Inorganic Chemistry, Technology and Materials, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovak Republic*

With quick development of advanced material technology, there is significant demand for new, complex molecules, to accomplish the more and more expeditious applications. In this field, spin-crossover complexes possess a unique combination of magnetic and photoresponsive properties, which is of great interest in preparation of photoswitches and future optical memory media.¹ General lack of commercially available photoisomerisable ligands and their non-trivial syntheses motivated us to explore new synthetic pathways to access these interesting compounds.

Herein, we present synthesis of bidentate and tridentate pyridine based ligands, bearing photoisomerisable azobenzene and anthracene moieties (Figure 1). Construction of diazene linkage relied on Mills reaction or Buchwald-Hartwig coupling, followed by oxidation.^{2,3} Ethynylantracene ligands were prepared via Sonogashira cross-coupling. All ligands were synthesized on gram-scale from commercially available materials in up to 65 % overall yields.

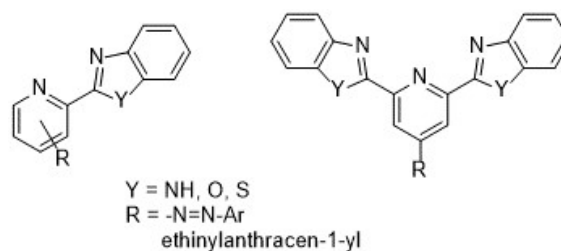


Figure 1 Structures of presented ligands.

Grant agency (APVV-18-0197) is acknowledged for the financial support.

- [1] Brachňaková B., Šalitroš I.: *Chem. Pap.* 72, 773 (2018).
- [2] Schmidt S. O., Naggert H., Buchholz A., Brandenburg H., Bannwarth A., Plass W., Tuzcek F.: *Eur. J. Inorg. Chem.* 2175 (2016).
- [3] Lim Y. K., Lee K. S., Cho C. G.: *Org. Lett.* 5, 979 (2003).

4P11 5-PHENYLAZOPYRIMIDINES PROBED BY NMR SPECTROSCOPY WITH IN SITU IRRADIATION

Lucie Mužíková Čechová¹, Juraj Filo², Martin Dračínský¹, Zlatko Janeba¹, Marek Cigán², Eliška Procházková¹

¹*Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, the Czech Academy of Sciences, Flemingovo nám. 2, 166 10 Prague, Czech Republic
prochazkova@uochb.cas.cz*

²*Comenius University, Faculty of Natural Sciences, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovakia*

Light-sensitive and highly colored 5-phenylazopyrimidines reversibly isomerize into the *cis* isomer upon UV/vis illumination, which makes them ideal candidates for incorporation into photosensitive “smart” materials as well as into biological systems.

In this work, we prepared azopyrimidines with an amino group (or NH-alkyl) in neighbouring positions (4 or/and 6) to the 5-azobenzene group (Fig. 1). The presence of two H-bond donors (in

positions 4 and 6) leads to two stable rotamers of the *trans* isomer differing only in the orientation of azobenzene group, clearly observed as two sets of NMR signals. We coupled NMR spectroscopy with a light source, where an optical fiber is guided directly into the NMR tube. Beside the well-known *trans*→*cis* photoisomerism, this method uncovered photoswitching between two rotamers, which can be considered as orthogonal photoswitching. Mechanism was proposed by DFT calculations. [1] Detailed photochemical study showed that our compounds are non-fluorescent and have lower quantum yields than those found in unsubstituted azobenzenes. Thermal stability of the *cis* isomer can be finely tuned by a suitable substitution. [2] We designed dinitrophenyl azopyrimidines with strong push-pull character based on DFT calculations and they are currently the fastest non-ionic photochromic oscillators ($\tau_{1/2} = 2 \text{ ns} - 400 \text{ ms}$). [3]

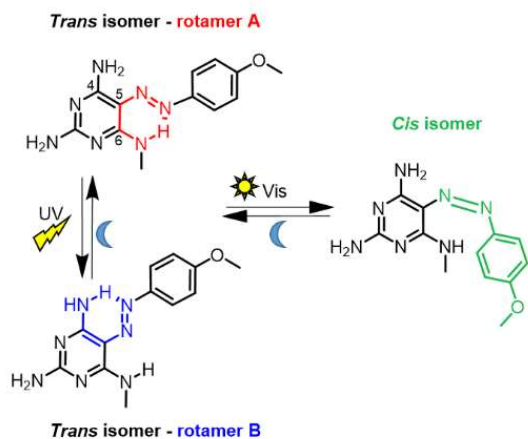


Fig. 1 Orthogonal photoswitching in azopyrimidines with two possible *trans* isomers revealed by NMR spectroscopy with *in situ* irradiation measured at low temperatures.

This work was supported by the Czech Science Foundation (grant No 20-01472S).

- [1] Procházková E., Čechová L., Kind J., Janeba Z., Thiele C., Dračínský M.: *Chem. Eur. J.* 24, 492 (2018).
- [2] Čechová L., Kind J., Dračínský M., Filo J., Janeba Z., Thiele C., Cigáň M., Procházková E.: *J. Org. Chem.* 83, 5986 (2018).
- [3] Čechová L., Filo J., Dračínský M., Slavov C., Sun D., Janeba Z., Slanina T., Wachtveitl J., Procházková E., Cigáň M.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 59, 15590 (2020).

4P12 COPPER MEDIATED PHOTO-ATRP UNDER SPECIFIC POLYMERIZATION CONDITIONS

Jaroslav Mosnáček^{1,2}, Jozef Kollár¹, Dmitrij Bondarev¹, Ana Hološ¹, Gamal Zain¹, Rubina Karim², Anita Eckstein¹, Katarína Borská¹, Daniela Moravčíková¹

¹*Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, 845 41 Bratislava, Slovakia, jaroslav.mosnacek@savba.sk*
²*CEMEA, Slovak Academy of Sciences, 845 11 Bratislava, Slovakia*

In recent years, the reduction of the deactivator in atom transfer radical polymerization (ATRP) was reported using various stimuli allowing external control over the activator/deactivator ratio without addition of any additional chemicals.

Here well-defined poly(meth)acrylates were prepared via photochemically induced atom transfer radical polymerization (photoATRP) using ppm amounts of copper catalyst complexes without degassing of polymerization mixture and with no need to introduce an external reducing agent to the system [1,2]. Effect of ligand to CuBr^2 ratio on kinetic and induction period during polymerization was investigated. The induction period was influenced also by amount of oxygen in the polymerization system. Light intensity affected both the kinetic of polymerization and the induction period. In addition, the effect of partial replacement of the excess of expensive ligands with cheaper tertiary amines on kinetics of the polymerization was investigated in various solvents. The addition of triethylamine to photoATRP system resulted in both significant shortening the induction period and increasing the polymerization rate [3,4]. High livingness of the oxygen tolerant photoATRP system containing triethylamine was proved by chain-extension polymerizations resulting in formation of block copolymer. The presented photoATRP system was further optimized for flow polymerization and polymerizations under heterogenous conditions and/or in the presence of carbon nanofillers.

The authors thank the grant Agency VEGA for financial support through Grant VEGA 2/0129/19 and project APVV-19-0338. This work was also performed during the implementation of the project Building-up Centre for advanced materials application of the Slovak Academy of Sciences, ITMS project code 313021T081 supported by the Integrated Infrastructure Operational Programme funded by the ERDF.

- [1] J. Mosnacek, A. Eckstein-Andicsova, K. Borska, *Polymer Chemistry* 6, 2523 (2015)
- [2] K. Borska, D. Moravcikova, J. Mosnacek, *Macromol. Rapid Commun.* 38, 1600639 (2017)
- [3] D. Bondarev, K. Borská, M. Šoral, D. Moravčíková, J. Mosnáček, *Polymer* 161, 122 (2019)
- [4] G. Zain, D. Bondarev, J. Doháňošová, J. Mosnáček, *ChemPhotoChem* 3, 1138 (2019)

4P13 PHOSPHORUS BASED SELF- IMMOLATIVE LINKERS

Markéta Tichotová¹, Petr Šimon², Juraj Filo³, Marek Cigán³, Eliška Procházková¹, Ondřej Baszczyński²

¹*Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Czech Academy of Sciences, Prague 166 10, Czech Republic.* ²*Faculty of Science, Charles University, Prague 128 43, Czech Republic,* ondrej.baszczyński@natur.cuni.cz.

³*Department of Organic Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Bratislava 842 15, Slovakia.*

Self-immolative (SI) linkers are chemical constructs which undergo irreversible defragmentation upon external activation, releasing a cargo (leaving group). Controlling the cargo release is useful in various applications such as drug delivery and smart materials. SI linkers differ in their structural motifs having e.g., a carbamate or phosphate group to bind a cargo. To understand the SI on phosphorus, we designed new methodology using a combination of a photocleavable trigger and *in situ* ³¹P NMR irradiation experiments. We prepared and studied several series of phosphate-based SI linkers leading to following findings:

Firstly, we studied phosphoramidate linkers containing various amino acids (AA) [1]. We found that SI strongly depends on steric demands in the alpha position of AA, and sterically demanding valine- and phenylalanine-based linkers showed the highest SI rate, in line with the Thorpe-Ingold effect. Secondly, we examined a group of ethylene-glycol phosphate-based linkers which offer formation of stable cyclic intermediates. Monitoring the cyclic intermediates allowed us to distinguish the SI process from a chemical hydrolysis [2]. Finally, a series of substituted glycolate linkers allowed us to design a double cargo release systems which are driven by both SI and chemical hydrolysis [3].

This work was supported by the Experientia Foundation (O.B., Start-Up grant SG-2018-1), the

Czech Science Foundation (O.B., grant No. 20-25137Y, and E.P., grant No. 21-23014S), the University Scientific Park of Comenius University in Bratislava (ITMS 26240220086, M.C.), and the Slovak Research and Development Agency (M.C., grant APVV-15-0495). We would also like to acknowledge Kvetoslava Kertisová, from the Mass Spectrometry Department at IOCB, for the HR-MS.

- [1] Procházková E, et al. *Eur. J. Org. Chem.*, 2020, 7, 897-906.
- [2] Procházková E, et al. *Chem. Commun.*, 2021, 57, 211-214.
- [3] Šimon P, Tichotová M, et al. *Chem. Eur. J.*, accepted, doi: 10.1002/chem.202101805.

4P14 VIDITEĽNÝM SVETLOM INICIOVANÝ KROS-KAPLING KATRITZKÉHO SOLÍ A NITROSTYRÉNOV

Michaela Marčeková¹, Branislav Ferko¹, Katarína Ráchel Detková¹, Dušan Berkeš¹ a Pavol Jakubec¹

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

Kros-kaplingové reakcie sa považujú za jeden z najspoľahlivejších a najrozšírejších spôsobov tvorby novej väzby v organickej chémii. Medzi najobľúbenejšie radíme Stilleho, Suzukiho alebo Heckovu reakciu, ktoré sú katalyzované prechodnými kovmi. Nedávno vývoj nových transformácií urýchlila aplikácia netradičných kaplingových partnerov a tiež pokrok vo fotoredoxnej katalýze a elektrochémií. Mnohé novodobé kros-kaplingy využívajú nitrozlučeniny, obzvlášť β-nitrostyrény.[1] Tie sú zvyčajne stabilné tuhé látky, ktoré sú dostupné nielen viacerými syntetickými cestami ako Henryho reakciou, ale aj komerčne. Od objavu Seebacha a Russella pravažná väčšina denitračných reakcií podlieha adično-elimináčnemu mechanizmu.[2]

Na základe vytvoreného predpokladu o využití radikálov v denitračných kaplingov boli v našej práci ako kaplingoví partneri navrhnuté Katritzkého soli. Vďaka ich schopnosti tvoriť EDA komplex pri laboratórnej teplote slúžia ako zdroj radikálu aj bez prítomnosti katalyzátora. Rozsiahly skrining reakčných podmienok započal reakciou p-metoxynitrostyrénu s benzylickou Katritzkého soľou, aby sa v základných podmienkach zabránilo nežiadúcej polymerizácii. Následne po mnohých experimentoch boli

stanovené najvhodnejšie reakčné podmienky (Schéma 1).

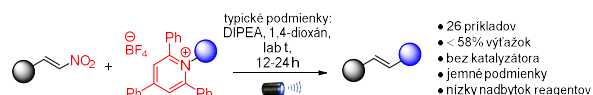


Schéma 1: Denitračný kros-kapling nitrostyrénov

Objavený denitračný kros-kapling toleruje viacero funkčných skupín a bol úspešne prevedený s Katritzského soľami obsahujúce benzylické substituenty nesúce bróm alebo trifluórmetylóvú skupinu v rôznych pozíciách. Rovnako úspešné boli rôzne cyklické a heterocyklické soli, substráty nesúce primárnu alebo sekundárnu hydroxylovú skupinu a deriváty aminokyselín. Aromatické nitrostyrény s rozmanitými substituentami (metoxy, bróm, jód a metyl) a tiež funkcionalizovaný heteroaromát úspešne podstúpili denitračný kros-kapling. [3]

Práca vznikla za podpory Vedeckej grantovej agentúry MŠVVaŠ a SAV a Agentúry na podporu výskumu a vývoja (zmluva č.VEGA 1/0489/19 a APVV-20-0298) a grantu v rámci Programu na podporu mladých výskumných pracovníkov na STU v Bratislave.

- [1] Marčeková M., Ferko B., Detková K. R., Jakubec, P.: *Molecules*. 25 (15), 3390 (2020).
 [2] Seebach, D., Schäfer, H., Schmidt, B.; Schreiber, M. *Angew. Chem. Int. Ed.* 31, 1587-1588 (1992).
 [3] Ferko B., Marčeková M., Detková K. R., Doháňošová J., Berkeš D., Jakubec, P.: *Odoslané do tlače.* (2021).

4P15

DITHIENYLNAPHTHALENES AND QUATERTHIOPHENES AS N-TYPE ORGANIC SEMICONDUCTORS IN OFET

Lucia Feriancová¹, Martin Putala¹

Comenius University, Faculty of Natural Sciences, Department of Organic Chemistry, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovakia, feriancova13@uniba.sk

Benefits of applying organic materials in the active layer of organic field-effect transistor (OFET) include inexpensive solution-based techniques for deposition and structure modification via functionalisation to obtain compounds with appropriate properties. [1] Despite the rapid development in n-type organic semiconductors, their design resulting in suitable properties for organic electronics is not trivial and therefore still lags behind the p-type materials.

Herein, we report the synthesis of derivatives with two different conjugated oligoaryl cores

(TNT or 4T) substituted with various electron-withdrawing groups **R** for application as n-type organic semiconductors (Fig. 1). The synthesis of the target compounds required searching for a suitable synthetic approach and optimising the reaction conditions. The key steps in their synthesis were mainly Suzuki or Stille cross-coupling reactions and possibly Knoevenagel condensation. In addition, advanced spectral and electrochemical characterisation of the compounds will be presented and compared with theoretically predicted characteristics of frontier orbitals. Prepared derivatives exhibited promising semiconducting properties in the OFET device with electron mobility up to 0.57 cm²/Vs.

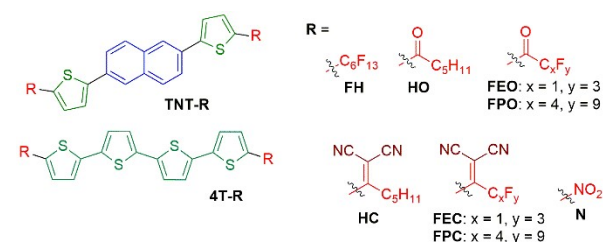


Fig. 1 Designed dithienylnaphthalenes and quaterthiophenes for application in OFET.

- [1] Quinn J., Zhu J., Li X., Wang, J., Li, Y. *J. Mater. Chem. C* 5, 8654 (2017).
 [2] Filo J., Mišičák R., Cigán M., Weis, M., Jakabovič, J., Gmucová, K., Pavúk, M., Dobročka, E., Putala, M. *Synth. Met.* 202, 73 (2015).
 [3] Feriancová, L.; Cigán, M.; Gmucová, K.; Kožíšek, J.; Nádaždy, V.; Putala *New J. Chem.* 45, 9794 (2021).

4P16

FUNCTIONALIZATION OF BRIDGED CYCLOALKANES

Radim Hrdina¹

¹Department of Organic Chemistry, Faculty of Science, Charles University in Prague, Czech Republic

Synthesis of 1,2-disubstituted bridged cycloalkanes from *mono*-substituted starting materials will be presented. [1] This work focuses on substrates, which lack the reactivity of the C=C double bond and require C–H bond functionalization to install the 1,2-substitution pattern, with adamantane as the main model compound. Directed C–H bond functionalization *via* Rh(II) catalyzed intramolecular insertion reactions, [2] C–H activation reactions catalyzed by Pd(II) complexes [3] and undirected oxidation reactions will be discussed. Mechanistic studies of these transformations were performed and

refer about the reactivity of such class of aliphatic compounds. New post-functionalization reactions and applications of obtained compounds in catalysis and drug development will be proposed.

Financial support of the Faculty of Science of Charles University is acknowledged.

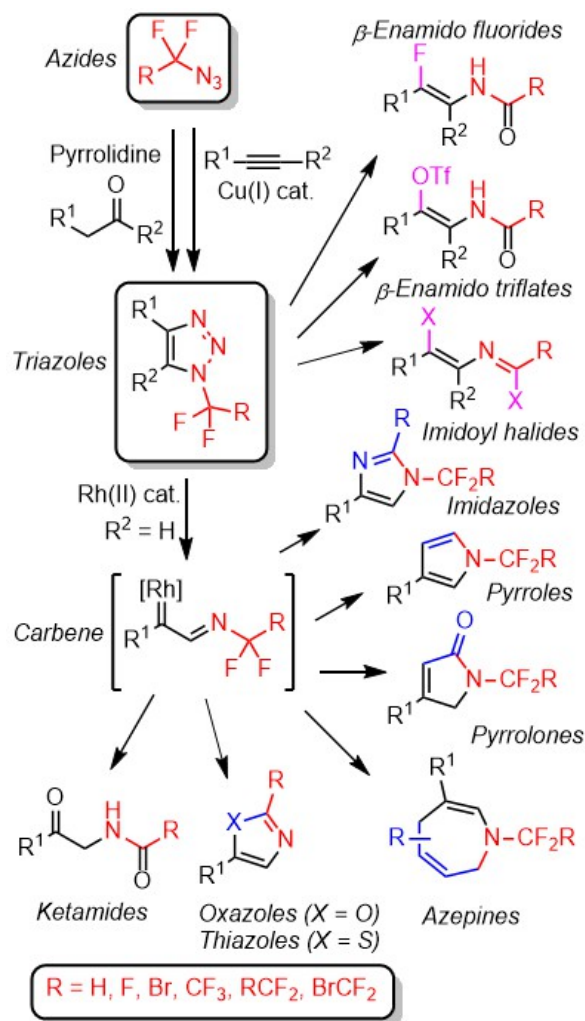
- [1] Hrdina R.: *Synthesis*. 51, 629 (2019).
 [2] Hrdina R., Larrosa M., Logemann C.: *J. Org. Chem.* 82, 4891 (2017)
 [3] Larrosa M., Zonker B., Volkmann J., Wech F., Logemann C., Hausmann H., Hrdina R.: *Chem. Eur. J.* 24, 6269 (2018)

4P17 FLUORINATED AZIDOALKANES – PREPARATION, STABILITY AND UTILIZATION IN SYNTHESIS

Petr Beier¹, Athanasios Markos¹, Svatava Voltrová¹,
 Olga Bakhanovich¹, David Tichý¹, Lukáš Janecký¹

¹Institute of Organic Chemistry and Biochemistry,
 Academy of Sciences of the Czech Republic,
 Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha 6,
 beier@uochb.cas.cz

A new group of organic azides was recently introduced by us – fluorinated azidoalkanes. The presentation will summarize methods for their synthesis, their properties, stability and reactivity. Of particular interest are cycloaddition reactions to N-fluoroalkyl-1,2,3-triazoles. The triazoles were found to be excellent substrates for the preparation of N-fluoroalkyl-substituted nitrogen heterocycles via rhodium-catalyzed transannulations and to enamido triflates, imidoyl halides and enamido fluorides via vinyl cation chemistry (Scheme)[1-6].



Scheme

This work was financially supported by the Czech Academy of Sciences (Research Plan RVO: 61388963) and the Ministry of Education, Youth and Sports in the programme INTER-EXCELLENCE (LTAUSA18037).

- [1] Blastik Z.E., et al.: *Angew. Chem., Int. Ed.* 129, 346 (2017).
 [2] Tichý D., et al.: *J. Org. Chem.* 85, 11482 (2020).
 [3] Markos A., et al.: *Chem. Eur. J.* 25, 7640 (2019).
 [4] Motornov V., et al.: *Chem. Commun.* 54, 3258 (2018).
 [5] Markos A., et al.: *Adv. Synth. Catal.* 363, 3258 (2021).
 [6] Markos A., et al.: *Org. Lett.* 23, 4224 (2021).

4P18

INDUKOVANÉ ŠTIEPENIE N-N A C-F VÄZIEB AROMATICKÝCH FLUÓROVANÝCH HYDRAZÓNŮV

Dušan Bortňák, Daniel Végh, Jakub Šofranko, Branislav Pavilek, Viktor Milata

Oddelenie organickej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovensko,

Hydrazóny sú zlúčeniny sumárneho vzorca $R^1R^2C=N-NH-R^3$, ktoré obsahujú azometínovú skupinu. Pri syntéze hydrazónov sa najčastejšie využívajú kondenzačné reakcie. O hydrazóny je všeobecne široký záujem nielen v medicínskej chémii v agrochémii ale tiež v materiálovej chémii. *N*-pentafluórfenyl hydrazóny možno pripraviť kondenzačnou reakciou príslušnej karbonylovej zlúčeniny s pentafluórfenylhydrazínom s prídavkom kyselín alebo aj bez ich prídavku. V oblasti prípravy *N*-perfluórfenyl hydrazónov sa vyriešila syntéza 21 derivátov pentafluórfenylhydrazónov reakciou pentafluórfenylhydrazínu s odpovedajúcimi aromatickými a heteroaromatickými aldehydmi vo vysokých výťažkoch a s vyriešením kompletných fyzikálno-chemických vlastností (Schéma 1).

Pri štúdiu reaktivity syntetizovaných hydrazónov sa študovala nukleofilná substitúcia atómov fluóru na *N*-perfluórfenylom jadre s azidovým a kyanidovým aniónom. Najvýznamnejším výsledkom týchto reakcií je nájdenie **doposiaľ nepozorovanej fragmentácie väzby N-N** *N*-pentafluórfenylhydrazónov za súčasného vzniku defluórovaného 2,3,5,6-tetrafluórfenylanilínu a odpovedajúcich aromatických nitrilov. Predložená fragmentačná reakcia poskytuje **novú metódu syntézy aromatických a heteroaromatických nitrilov a novú syntézu 2,3,5,6-tetrafluóranilínu** (Schéma 1). Navrhol sa mechanizmus tejto doposiaľ nepopísanej fragmentácie, elektrónová a štruktúrna ohraničenosť (nitroskupina na aromatickom jadre a alifatické hydrazóny), študovali sa hmotnostné spektrá a fragmentácie^{1,2}.

Štruktúry finálnych produktov boli charakterizované ¹H NMR, ¹³C NMR, ¹⁹F NMR, HSQC, HMBC, ¹⁹F-¹³C-HSQC, ¹⁹F-¹³C-HMBC, INADEQUATE, COSY, ¹⁹F-dekaplovanou-¹³C NMR, UV, IČ, HRMS spektrami a röntgenovou štruktúrnou analýzou.

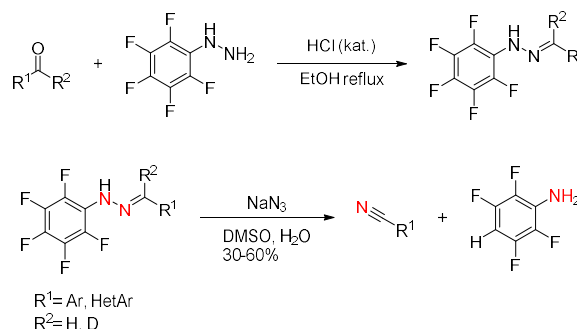


Schéma 1: Príprava a reaktivita *N*-pentafluórfenylhydrazónov

Táto práca bola finančne podporená agentúrou pre vedu a výskum v rámci projektovej úlohy č. APVV-17-0513.

- [1] Bortňák, D.; Milata, V.; Šofranko, J.; Végh, D.; Prousek, J.; Barbieriková, Z.; Breza, M.; Brezová, V.; Dvoranová, D.; Šoral, M. *ChemistrySelect* **2020**, 5 (13), 3929.
- [2] Bortňák, D.; Pecher, D.; Végh, D.; Breza, M.; Mikuš, P.; Milata, V. *J. Mass Spectrom.* **2020**, 55 (10), 4540.

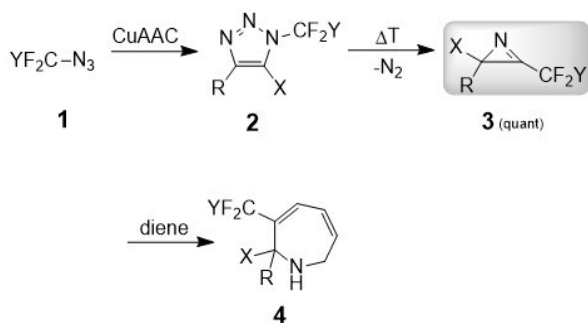
4P19

THERMALLY-INDUCED TRANSFORMATION OF 1-FLUOROALKYL-1,2,3-TRIAZOLES

Svatava Voltrová¹, Athanasios Markos¹, Petr Beier*¹

¹*Institute of Organic Chemistry and Biochemistry of the Czech Academy of Sciences, Flemingovo nám. 542/2, 160 00 Praha 6, voltrova@uochb.cas.cz*

Organic azides containing directly connected difluoromethylene group to the azido group $Y-CF_2N_3$ (**1**, $Y = H, F, CF_3$) are unexpectedly stable compounds even at temperatures above 150 °C [1,2]. However, the corresponding triazoles **2**, easily available via copper-catalyzed azide-alkyne cycloaddition (CuAAC) at these temperatures undergo a series of rearrangements and denitrogenation to form previously inaccessible 3-fluoroalkyl-2*H*-azirines **3** in excellent yields (Scheme 1).



Scheme 1 Formation of azirines and an example of their reactivity.

The reaction has a broad substrate scope and good functional group tolerance. Additionally, isotope labelled experiments suggest a mechanism involving the formation of azavinyl carbene, ketenimine and vinyl nitrene as reactive intermediates. Moreover, azirines **3** have been shown as powerful intermediates e.g. in the synthesis of azepines **4** (Scheme 1).

This work was supported by the Czech Academy of Sciences (Research Plan RVO:61388963) and the Ministry of Education, Youth and Sports in the programme INTER-EXCELLENCE (LTAUSA18037).

[1] Beier P.: *Synthesis* 51, A115 (2019).

[2] Bakhanovich O., Beier P.: *Chem. Eur. J.* 26, 773 (2020).

4P20

SYNTÉZA TETRAHYDROXYLOVANÝCH SPIROINDOLIZIDÍNŮV

Paula Fraňová¹, Štefan Marchalín¹, Peter Šafář¹

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

Polyhydroxylované indolizidíny tvoria jednu z piatich kategórií tzv. iminosacharidov - dusíkatých analógov iminocukrov, ktoré sú schopné mimikovať prírodné sacharidy. Následkom tejto štruktúrnej vlastnosti dokážu iminosacharidy účinne a selektívne inhibovať glykozidázy. Tieto enzýmy katalyzujú hydrolýzu glykozidovej väzby sacharidov a glykokonjugátov, teda sú súčasťou veľkého množstva biolo-

gicky dôležitých procesov ako napríklad post-translačné spracovávanie proteínov, lyzozomálny katabolizmus glykokonjugátov a iné.

Najznámejšími reprezentantmi polyhydroxylovaných indolizidínov sú kastanospermín, špecifický inhibitor α -D-glukozidáz I a II, a swainsonín, ktorý inhibuje lyzozomálnu α -manozidázu a manozidázu II. Vďaka ich inhibičným účinkom bola u týchto látok preukázaná antimetastatická, antiproliferačná, protirakovinová, imunoregulačná a antivirálna aktivita. Účinnosť a selektivita inhibície glykozidáz sa mení v závislosti od absolútnej konfigurácie, počtu a umiestnenia hydroxylových skupín na indolizidínovom jadre. Pre lepšie pochopenie vzťahu medzi štruktúrou a aktivitou týchto látok je nutné hľadať nové syntetické stratégie, ktorými vieme vybudovať rozmanitú skupinu polyhydroxylovaných indolizidínov s variáciami v počte a absolútnej konfigurácii hydroxylových skupín.

Aktuálne prebiehajúci projekt nášho výskumného tímu sa zaoberá prípravou cieľových tetrahydroxylovaných spirocyclopentán-indolizidínov. Pri syntéze týchto originálnych funkcionalizovaných analógov alkaloidov indolizidínového typu sa ako chirálny stavebný blok využil dihydrofuro[2,3-f]indolizidín, ľahkodostupný z lacných biozdrojov: kyseliny (*L*)-glutámovej a 2-furaldehydu v piatich krokoch. Jeho kľúčovými transformáciami sú α -alkylácia amidu, cis-dihydroxylácia alkénu a intramolekulová alkénová metatéza.

Práca vznikla za podpory Vedeckej grantovej agentúry (VEGA 1/0262/19) a Agentúry pre vedu a výskum (APVV-17-0513).

[1] Fraňová P.; Marchalín Š.; Šafář P.; Cvečko M.; Moncol J.; Tóthova I.; Othman M.; Daich A. *New J. Chem.*, **2021**. (submitted)

[2] Compain, P.; Martin, O. R., Eds. *Iminosugars. From Synthesis to Therapeutic Applications*; John Wiley & Sons, Ltd: Chichester, **2007**.

[3] Watson, A. A.; Fleet, G. W.; Asano, N.; Molyneux, R. J.; Nash, R. J. J. P. *Phytochemistry* **2001**, 56 (3), 265-295

PREDNÁŠKY - SEKCIA 5 VYUČOVANIE A HISTÓRIA CHÉMIE

5P01 KONCEPCIA PRÍRODOVEDNÉHO VZDELÁVANIA PRE ZÁKLADNÚ ŠKOLU

Katarína Kotuláková¹, Ľubomír Held¹

¹Trnavská univerzita v Trnave, Hornopotočná 23, 918 23 Trnava, katarina.kotulakova@truni.sk

Plán obnovy, ktorý schválila Vláda SR a ktorého veľkou kapitolou je aj školstvo a vzdelávanie, prináša dnes reálnu šancu na zmysluplnú a na všetkých zainteresovaných úrovniach realizovateľnú zmenu (nie len) prírodovedného, resp. chemického vzdelávania. Koncepcia stavia na koordinácii obsahov prírodovedných predmetov, ktoré sa sústreďujú na rozvoj kľúčových tém [1]. Nevyhnutnou sa zdá byť didaktická rekonštrukcia dnešnej podoby obsahov a spôsobu ich sprostredkovania žiakovi rešpektujúc jeho kognitívny vývin i jeho prekoncepty. Kľúčovou sa stáva činnosť, nie názornosť, dávanie zmyslu skúsenostiam namiesto učenia sa z textu s jasným akcentom na indukčné prístupy [2]. Cieľom prírodovedného vzdelávania v dnešnej dobe a dnešnej spoločnosti nie je len sprostredkovanie poznatkov a porozumenia. Koncept prírodovednej gramotnosti v sebe nevyhnutne zahŕňa aj rozvoj spôsobilosti vedeckej práce, t. j. spôsob objektívneho skúmania a kritického uvažovania, porozumenia tomu, ako funguje veda, a pod. Personálna i materiálna konštelácia okolo avizovanej rekonštrukcie kurikula dáva nádej na jej zmysluplnú prípravu i implementáciu.

Doterajšie výskumy boli podporované grantovou agentúrou APVV v rámci projektu APVV 14 – 70 a príprava učiteľov v uvedenom smere zasa projektom VEGA č. 1/0661/21 Výskum spôsobilosti učiteľov prírodovedných predmetov nižšieho sekundárneho vzdelávania naplniť ciele prírodovedného vzdelávania.

- [1] Harlen, W (Ed.): *Principles and big ideas of science education*. Ashford Colour Press (2010).
[2] Held, Ľ. a kol.: *Koncepcia prírodovedného kurikula pre základnú školu 2020*. VEDA (2019).

5P02 ALTERNATÍVNE UČEBNICE CHÉMIE PRE ZÁKLADNÚ ŠKOLU

Ľubomír Held¹, Katarína Kotuláková¹

¹Trnavská univerzita, Hornopotočná 23, 918 23 Trnava, lubomir.held@truni.sk

Voľný trh s učebnicami je možno blízka budúcnosť aj na Slovensku. Ohlasujú to politické dokumenty súčasnej vlády a súčasne centrálné organizácie v oblasti vzdelávania ohlasujú kurikulárnu reformu. Samozrejme očakávaná školských zmien sú motiváciou pre vedecko-výskumnú činnosť v odborových didaktikách [1] a tiež činnosti neziskových organizácií pôsobiacich vo vzdelávaní.

Cieľom príspevku je predstaviť tvorbu učebníc chémie, tvoriace spolu s učebnicami biológie, fyziky a fyzickej geografie program ExpEdícia a ktoré sú postupne publikované neziskovou organizáciou Indícia [2,3].

Bezprostredná potreba obsahovej reformy prírodovedného vzdelávania vychádza z nelichotivých výsledkov medzinárodných meraní PISA v prospech slovenského školského systému, negatívneho hodnotenia prírodovedného vzdelávania na úrovni Európskej únie ako aj snáh o presadenie konštruktivistického vzdelávacieho paradigmatu v dominantných krajinách sveta v podobe IBSE.

Metodologicky sú obsahy jednotlivých odborných tém koncipované na základe didaktických rekonštrukcií rešpektujúcich aktuálny stav predstáv detí o chemických javoch a ich teoretických vysvetleniach na jednej strane a historický vývin poznávania týchto javov na strane druhej. Samotný vývoj učebníc rešpektuje tiež zásady konštruktívneho výskumu v odborových didaktikách s viacnásobnými iteráciami v rámci pilotáže v piatich základných školách, resp. osemročnom gymnáziu.

Prednáška prináša ukážky konkrétnych didaktických riešení vybraných chemických tém s dôrazom na rozvoj spôsobilostí vedeckej práce žiakov.

Doterajšie výskumy boli podporované grantovou agentúrou APVV v rámci projektu APVV 14 – 70 a príprava učiteľov v uvedenom smere zasa projektom VEGA č. 1/0661/21 Výskum spôsobilosti učiteľov prírodovedných predmetov nižšieho sekundárneho

vzdelávania naplniť ciele prírodovedného vzdelávania.

- [1] Held, L. et al. *Koncepcia prírodovedného kurikula pre základnú školu 2020*. - Trnava : Typi Universitatis Tyrnaviensis, spoločné pracovisko Trnavskej univerzity v Trnave a Vedy, vydavateľstva Slovenskej akadémie vied, ISBN 978-80-568-0197-0. 377s., (2019).
- [2] Held, L., Bronerská, J., Kotuláková, K., Kováčová, L., Orolínová, M. *ExpEdícia skús, skúmaj, spoznaj : chémia pre 7. ročník základnej školy a pre sekundu osemročných gymnázií*. [Ed: Borovská, L.] - 2. prepracované vydanie. - Bratislava : Indícia, 2021. - 116 s. - ISBN 978 80 89859 59 7.
- [3] Held, L., Bronerská, J., Kotuláková, K., Koperová, D. *ExpEdícia skús, skúmaj, spoznaj : chémia pre 8. ročník základnej školy a pre sekundu osemročných gymnázií*. [Ed: Borovská, L.] - 1. vydanie. - Bratislava : Indícia, 2021. - 110 s. - ISBN 978-80-89859-60-3.

5P03 HISTÓRIA CHEMICKÉHO PRIEMYSLU NA SLOVENSKU DOPÍSANÁ

Michal Uher¹, Viktor Milata¹, Ľudovít Hallon²,
Miroslav Sabol²

¹*Oddelenie organickej chémie, Ústav organickej chémie, katalýzy a petrochémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, viktor.milata@stuba.sk*

²*Historický ústav SAV, Klemensova 19, P.O. Box 198, SK-814 99 Bratislava*

V roku 2010 vyšla Odborná skupina História chémie SCHS s návrhom napísať a vydať históriu chemického priemyslu pod názvom Chemický priemysel v zrkadle dejín Slovenska.

Dnes, v roku 2021 môžeme konštatovať, že návrh je uskutočnený a chemický priemysel je spracovaný v 16 zväzkoch.

Časová hranica bola stanovená rokom 1990, kedy nastali v našom štáte vlastnícke zmeny.

V prednáške bude podrobnejšie prezentovaný osud jednotlivých zväzkov, autorov ako aj problémy získania materiálov na ich spracovanie.

Vydanie kompletného diela realizovali pracovníci Vydavateľstva STU pod vedením Ing. Evy Troščákovej a Ing. Romana Zsigu, ktorým patrí naše poďakovanie.

Diela boli podporené po stránke vedecko-výskumnej grantami VEGA udelených Historickému ústavu SAV v spolupráci v Fakultou chemickej a potravinárskej technológie STU a po stránke realizačnej nasledovnými grantami KEGA:

VEGA 2/0109/10 (roky 2010 – 2011), 2/0164/13 (roky 2014-2016), 2/0042/16 (roky 2016 - 2018), 2/0035/19 (roky 2019 - 2021).

KEGA 014-013STU-4/2010(2010-2011), 069STU-4/2012 (2012-2014) a 034STU-4/2017 (2017-2019).

- [1] Milata V., Uher M.: ChemZi 16(2), 70 (2021).

5P04 AUGMENTED COOPERATION IN EDUCATION AND TRAINING IN NUCLEAR AND RADIOCHEMISTRY

Martin Šácha^{1,2}, J. John^{1,2}, M. Němec^{1,2}

¹*Department of Nuclear Chemistry, Czech Technical University in Prague, 115 19 Prague, Czechia, martin.sacha@fffi.cvut.cz*

²*on behalf of A-CINCH consortium, www.cinch-project.eu*

The A-CINCH project is the latest project in the series of CINCH projects. It primarily addresses the loss of the young generation's interest for nuclear knowledge by focusing on secondary, high school students and teachers and involving them by the “Learn through Play” concept. In addition, it focuses on coordination activities in both education and training field at all levels of academic and professional career in nuclear and radiochemistry (NRC). To address these target groups and to attract efficiently their attention, advanced educational techniques such as state-of-the-art 3D virtual reality NRC laboratory, Massive Open Online Courses, RoboLab distance operated robotic experiments, Interactive Screen Experiments, NucWik database of teaching materials, or Flipped Classroom, are being introduced into the NRC education. Nuclear awareness is strengthened by the High School Teaching Package, Summer Schools for high school students, Teach the Teacher package and others.

Current A-CINCH progress will be presented, namely Massive Open On-line Courses runs and Virtual Laboratory development, which are high tech e-learning tools designed to attract younger students to the field of radiochemistry and chemistry in general. In addition, the recently established CINCH Vocational Education and Training e-shop will be presented as an entry point where students and professionals meet with the providers of courses and trainings.

5P05**TVORBA PROFESIJNE
ORIENTOVANÉHO ŠTUDIJNÉHO
PROGRAMU „CHEMICKÝ LABORANT
ŠPECIALISTA“ NA ÚCHV PF UPJŠ**

*Zuzana Vargová*¹, Miroslav Almáši¹, Michaela Rendošová¹, Renáta Oriňaková¹, Slávka Hamuláková¹, Rastislav Varháč¹, Viktor Víglaský¹, Jana Šandrejová¹, Mária Ganajová¹

¹Ústav chemických vied, PF UPJŠ, Moyzesova 11, 041 54 Košice, zuzana.vargova@upjs.sk

V 21. storočí sa zdôrazňuje význam výučby prírodovedných vied a matematiky pre ekonomický rast krajín. Dôraz vo vzdelávaní sa presúva od obsahu výučby na rozvoj zručností a spôsobilostí pre 21. storočie (cez obsah), ktoré súvisia s učením sa, ako aj s uplatnením mladých ľudí na trhu práce. Vzdelávanie musí rozvíjať zručnosti dôležité pre pracovnú silu, ktorá bude žiť v technologicky vyspelej ekonomike [1]. Na základe požiadaviek trhu práce na Slovensku ako aj na základe poznatkov z riešenia projektu KEGA 008UPJŠ „Inovácia obsahu, metód a foriem výučby praktických cvičení chemických odborov s priamou účasťou potenciálnych zamestnávateľov z praxe“ vyplýva, že na Slovensku je potrebné vytvoriť v rámci chémie študijný program, ktorého absolventi budú adresnejšie pripravení pre priamu prax. Vzájomným prepojením vedomostí a skúseností akademického prostredia a potenciálnych zamestnávateľov z praxe absolventi nadobudnú experimentálne zručnosti, ktoré použijú vo svojich potenciálnych zamestnaniach v prevádzkach a inštitúciách. Ústav chemických vied PF UPJŠ spolu s prevádzkami a inštitúciami zapojenými do tvorby profesijne orientovaného bakalárskeho študijného programu „Chemický laborant - špecialista“ vytvorí materiály a podklady pre vypracovanie akreditačného spisu pre kvalitné vzdelávanie mladej generácie pripravenej na prax. V príspevku budú prezentované východiská a postupy pre realizáciu stanoveného cieľa.

Pod'akovanie

Práca je finančne podporená grantom KEGA (číslo grantu: Projekt č. 006UPJŠ-4/2021).

- [1] Hanushek, E. A. a Woessmann L.. The Knowledge Capital of Nations. Cambridge, MA: MIT Press, 2015, p.262.

5P06**VYUČOVANIE PRÍRODOVEDY
PROSTREDNÍCTVOM VÝSKUMNE
LADENEJ KONCEPCIE**

Miroslava Jurečková¹, *Jarmila Kmet'ová*²

¹*Katedra elementárnej a predškolskej pedagogiky, Pedagogická fakulta, Univerzita Mateja Bela, Ružová 13, 974 11 Banská Bystrica, miroslava.jureckova@umb.sk*

²*Katedra chémie, Fakulta prírodných vied, Univerzita Mateja Bela, Tajovského 40, 974 01 Banská Bystrica, jarmila.kmetova@umb.sk*

Vo viacerých krajinách sveta prebieha inovácia vzdelávacích systémov, do ktorých sa zavádzajú nové edukačné procesy, ktorých hlavným cieľom je prispôbenie sa potrebám dnešnej spoločnosti. Preto sa v príspevku zameriavame na vplyv implementácie výskumne ladenej koncepcie prírodovedného vzdelávania do vyučovania prírodovedy v 3. ročníku ZŠ na úroveň vedomostí žiakov. Základné prírodovedné predstavy sa začínajú u detí formovať v predprimárnej a primárnej edukácii. Prírodovedné vzdelávanie pomáha žiakovi vyvinúť si vlastné spôsoby ako porozumieť svetu okolo nich. V zmysluplnom a efektívnom učení prírodných vied si žiaci dokážu vytvárať koncepty, ktoré im umožnia prepojiť vedomosti so skúsenosťami, osvoja si spôsoby získavania a následnej organizácie informácií, dokážu prakticky overovať svoje nápady a následne ich aplikovať do bežného života [1]. Nakoľko takéto vyučovanie buduje u žiakov prírodovedné (aj chemické) základy, v dnešnej dobe sa preto kladie veľký dôraz na výskumy v rámci implementácie IBSE do vyučovania prírodných vied už v primárnej edukácii.

Dokonca niektoré prieskumy uvádzajú, že po implementácii IBSE do vyučovacieho procesu sa zvýšil záujem žiakov o prírodu a učenie sa prírodovedných predmetov [2], čo považujeme za veľké pozitívum, nakoľko sa záujem žiakov o štúdium prírodovedných predmetov v posledných rokoch dramaticky znižoval. Výsledky nami realizovaného výskumu sú v zhode so závermi vyššie uvedených prieskumov.

- [1] Osman, K.: Primary Science: Knowing about the World through Science process Skills. *Asian Social Science*, 8 (16), Canadian center of Science and Education (2012).
- [2] Rocard, M. et al.: *Science education now. A renewed pedagogy for the future of Europe.* Brussels: European Committee

5P07**FORMATÍVNE HODNOTENIE VO VÝUČBE PRÍRODNÝCH VIED, MATEMATIKY A INFORMATIKY**Mária Ganajová¹, Ivana Sotáková¹¹Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta UPJŠ v Košiciach, Moyzesova 11, 040 01 Košice, maria.ganajova@upjs.sk

Príspevok informuje o publikovanej monografii s názvom *Formatívne hodnotenie vo výučbe prírodných vied, matematiky a informatiky* [1], ktorej cieľom je sprístupniť vedomosti o formatívnom hodnotení na teoretickej, praktickej (aplikačnej) a výskumnej úrovni. Poskytuje ucelený pohľad na formatívne hodnotenie z hľadiska jeho historického vývoja, charakteristík, efektívnosti, kladných a problémových stránok, ako aj jeho implementácie, monitorovania a poskytovania spätnej väzby vo výučbe.

Monografia ďalej sprístupňuje poznatky o stratégiách a nástrojoch formatívneho hodnotenia využiteľných vo výučbe prírodovedných predmetov (biológia, chémia a fyzika), matematiky a informatiky na základných a stredných školách. Informuje o výskumoch realizovaných na overovanie efektívnosti formatívneho hodnotenia. Z výskumov vyplynulo, že formatívne hodnotenie rozvíja u žiakov konceptuálne porozumenie, vedecké zručnosti a zručnosti pre 21. storočie potrebné pre ich uplatnenie sa na trhu práce [2, 3].

Na Slovensku však doposiaľ nedošlo k systémovému kroku, čo sa týka širokej a dôslednej implementácie formatívneho hodnotenia do výučby. Sprístupnená monografia poskytuje vedomosti a skúsenosti, ktoré môžu slúžiť ako východisko pre implementáciu formatívneho hodnotenia do výučby na všetkých stupňoch škôl a nielen prírodovedných predmetov.

Keďže monografia tohto typu na Slovensku absentovala, predpokladáme, že poskytne čitateľom rámec pre zohľadnenie formatívnych aspektov hodnotenia a prispeje k rozvoju odborových didaktík, všeobecnej didaktiky a pedagogiky v oblasti hodnotenia.

Príspevok vznikol s podporou projektu KEGA č. 004UPJŠ-4/2020 „Tvorba, implementácia a overovanie efektívnosti digitálnej knižnice s nástrojmi formatívneho hodnotenia pre prírodovedné predmety, matematiku a informatiku na základnej škole“.

[1] Ganajová, M., Brestenská, B., Guniš, J., Ješková, Z., Kireš, M., Lešková, A., Lukáč, S., Orosová,

R., Sotáková, I., Szarka, K., Šnajder, L.: *Formatívne hodnotenie vo výučbe prírodných vied, matematiky a informatiky*. 1. vyd. UPJŠ v Košiciach, Košice, (2021).

- [2] Babinčáková, M., Ganajová, M., Sotáková, I., Bernard, P.: Influence of Formative Assessment Classroom Techniques (FACTs) on student's outcomes in chemistry at secondary school. *Journal of Baltic Science Education*. 19(1) (2020) 36-49.
- [3] Ganajová, M., Sotáková, I., Lukáč, S., Ješková, Z., Jurková, V., Orosová, R.: Formative assessment as a tool to enhance the development of inquiry skills in science education. *Journal of Baltic Science Education*. 20(2) (2021) 204-222.

5P08**"ORIGAMI" PRO CHEMII A SMARTPHONE**Michal Lach¹, Jiří Kalina¹, Kateřina Trčková¹¹ Ostravská univerzita, Přírodovědecká fakulta, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava, Česká republika, P20024@student.osu.cz, jiri.kalina@osu.cz, katerina.trckova@osu.cz

V příspěvku je prezentována výroba funkčního modelu spektrofotometru a fotometru z papírové skládanky. Připravené modely pracují s volně dostupnými aplikacemi SpectraUPB [1] a Lux Light Meter [2] pro Android, které umožňují měření emisních spekter zdrojů popř. absorpčních spekter látek pomocí kamery a intenzitu osvětlení pomocí světelného senzoru.

Za účelem ověření funkčnosti spektrofotometru byly navrženy modelové úlohy: emisní spektra RGB LED, absorpční spektra a fotometrické stanovení koncentrace potravinářských barviv. Srovnatelné výsledky byly získány měřením na přístroji Go Direct SpectroVis Plus [3].

Zaváděním této jednoduché a cenově dostupné techniky napomáhá rozvíjení manuálních dovedností i představitosti žáků a v neposlední řadě k lepšímu porozumění principu měření na spektrofotometru. Nami vyrobený spektrofotometr a fotometr lze využít ve výuce chemie při stanovování koncentrace roztoků, skládání barev a barvy světla. Experimenty prováděné pomocí těchto levných papírových zařízení umožňují žákům lépe porozumět probírané problematice a vytvořit si představu o reálném měření v laboratoři.

Experimenty se dotýkají témat, jako jsou spektrofotometrie, barviva, příprava a ředění roztoků, stanovování koncentrace a dále pak témat mezipředmětových jako je skládání barev,

optika, monochromatické a polychromatické zdroje svetla atd. Úlohy jsou připraveny tak aby podporovaly zjišťování a ověřování informací, což dále vede k rozvíjení průřezového tématu mediální výchova.

Tato práce vznikla za podpory projektu SGS13/PřF/2021, Inovativní metody v distanční výuce chemie

- [1] Research UPB - Universidad Privada Boliviana. SpectraUPB (demo) 1.1 [software]. 22. března 2017 [cit. 2021-07-12]. Dostupné z: <https://play.google.com/store/apps/details?id=edu.upb.cinti.SpectraUPB>. Požadavky na systém: Android 4.4 a vyšší; velikost 2,6 MB
- [2] PRZEMEK PARDEL. Lux Light Meter & Tools - Photometer PRO 4.8.1 [software]. 8. července 2021 [cit. 2021-07-12]. Dostupné z: <https://play.google.com/store/apps/details?id=com.pardel.photometer>. Požadavky na systém: Android 7.0 a vyšší; velikost 5,5 MB
- [3] Vernier CZ - Vybavení pro výuku přírodovědných oborů - Go Direct spektrofotometr. Vernier CZ [online]. Edufor, 2021 [cit. 2021-7-12]. Dostupné z: <https://www.vernier.cz/produkty/podrobneinformace/kod/GDX-SVISPL>

5P09 FOTOKATALÝZA – PODPŮRNÉ MATERIÁLY SŠ

Kateřina Němcová, Václav Slovák

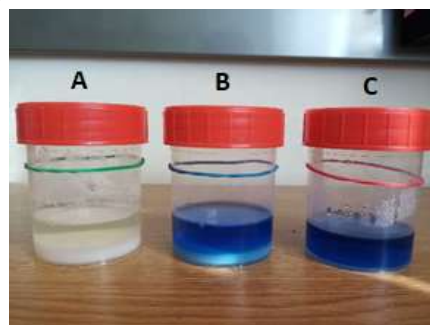
*Katedra chemie, Ostravská univerzita, 30. dubna 22,
701 03 Ostrava, p20025@student.osu.cz,
vaclav.slovak@osu.cz*

Fotokatalýza se stává stále častěji součástí našich životů, nicméně českých edukačních materiálů na toto téma pro žáky středních škol je nedostatek A když už se vyskytují, tak jsou obsahově náročnější nebo naopak danou problematiku příliš nerozvádějí. Stejný problém nastává i s fotokatalytickými pokusy, které jsou sice snadno proveditelné, ale skoro vždy za finanční a

prostředkovou bariérou, které ne všechny školy mohou překonat.

Byl vytvořen edukační text, který se jednoduchým a srozumitelným způsobem snaží i s pomocí moderních technologií vysvětlit princip, aplikace a mechanismus fotokatalýzy tak, aby ho pochopili i žáci, kteří o fotokatalýze slyší poprvé. Důležitou součástí jsou QR kódy zakomponované v edukačním textu, které doplňují text a umožňují propojení s externími odkazy ať už se jedná o doplňující články nebo vysvětlení, takže žák se může věnovat čistě jednomu textu a nemusí složitě hledat vysvětlení pojmu, který se v textu nachází.

Pro pokusy byl použit levný a snadno dostupný fotokatalytický nanodeodorant a fotokatalytická ústní voda. Oba prostředky projevují fotokatalytické schopnosti i pod slunečním zářením, takže odpadá nutnost použití UV lampy. Nejedná se o nebezpečné chemikálie, takže s nimi mohou pracovat i žáci sami. Navíc pokusy byly úspěšně provedeny s pomůckami a materiály, které jsou dostupné běžně v domácnosti.



Obr. 1 Nádoba A – obarvená voda s fotokatalytickým nanodeodorantem po pobytu na slunci, nádoba B – obarvená voda s fotokatalytickým nanodeodorantem po pobytu ve tmě, nádoba C – obarvená voda bez fotokatalytického nanodeodorantu po pobytu na slunci

PREDNÁŠKY - SEKCIA 6
APLIKOVANÁ CHÉMIA, ŽIVOTNÉ
PROSTREDIE A POLYMÉRY

6P01
IN CLOAKA VERITAS – ČO VIEME
VYČÍTAŤ Z ODPADOVÝCH VÔD

Igor Bodík¹, Dóra Varjúová¹, Tomáš Mackuľak¹

¹*Oddelenie environmentálneho inžinierstva FCHPT STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, igor.bodik@stuba.sk*

Rozvoj analytickej chémie v posledných rokoch posunul problematiku mikropolutantov v životnom prostredí do úplne inej roviny. Prejavuje sa to hlavne v oblasti odpadových vôd, kde prítomnosť napr. ilegálnych drog a rôznych druhov farmaceutík je v súčasnosti živo diskutovaná nielen v odbornej, ale aj v laickej verejnosti. Schopnosť detailne analyzovať splaškové vody otvára cestu k poznaniu mnohých súvislostí, ktoré boli schované pod „kanalizačným poklopom“. Okrem známych informácií, ako napr. koľko vody denne minie obyvateľ v meste, aká deravá je kanalizácia a koľko podzemnej (balastnej) vody vstupuje do kanalizácie, vieme z údajov z odpadovej vody identifikovať, v ktorom meste sa spotrebuje najviac kokaínu, ktoré antibiotikum je najviac predpisované v Košiciach, kde je najviac alergikov a pod. Venovali sme sa aj vzájomným koreláciám medzi vybranými diagnózami, pričom bola identifikovaná napr. pomerne vysoká korelácia ($r_{xy} = 0,84$) v spotrebe antibiotík a liekov na vysoký krvný tlak. Najnovšou, veľmi zaujímavou metódou využitia analýzy odpadových vôd je v takmer reálnom čase detegovať možný návrat či ohniská ochorenia COVID-19 v populácii.

Táto práca bola podporená Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy Zmluvy č. APVV-17-0119"

6P02
OVĚŘOVÁNÍ PRŮBĚHU ÚPRAVY VOD
PRO TEPLÁRENSTVÍ POMOCÍ
POTENCIOMETRIE S AMALGAMY
STŘÍBRA

Ladislav Novotný, Aneta Karásková, Petr Mikulášek

Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Studentská 573, 532 10 Pardubice, nvt.l@seznam.cz

V oboru teplárenství patří voda mezi základní vstupní suroviny. Její využití si však žádá sérii speciálních úprav [1]. Po předběžné úpravě vstupní vody následuje demineralizace, uchovávaní doplněné dalšími operacemi. Předběžná úprava zahrnuje koagulaci, flokulaci a filtraci. Využívá se přitom přísady Fe^{3+} s tendencí k tvorbě nerozpustných oxidů a hydroxidů železa, podpořenou případně přidáním vápna nebo NaOH. Během čiření probíhají mj. reakce mezi Fe^{3+} a H_2O , CO_2 či HCO_3^- a OH^- a Ca^{2+} a CO_3^{2-} ; výstupem je kal a vyčiřená voda. Ta je vedena na kyselý katex v H^+ formě a poté na bazický anex (např. stejného typu) ve slabší a pak i silnější (OH^-) formě. Výsledkem uvedených operací je kotelní a napájecí voda a kondenzát páry – a to vše ve vysoké kvalitě, podle ČSN 077401. Pro průběžné sledování těchto operací se z elektrochemických metod využívají dosud zejména dvě: měření elektrické vodivosti a zjišťování pH roztoků. Stále se zvyšující požadavky na kvalitu si však žádají hledání dalších dostupných možností kontroly za využití alternativních nezávislých metod. Toto sdělení (vycházející z nedávno navržených [2, 3] a dosud rozpracovávaných principů práce s využitím potenciometrie s různými amalgamovými elektrodami) je věnováno shrnutí dosud získaných poznatků o dalších možnostech využití potenciometrie pro výše uvedené účely.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR SGS_2021_003 a projektu Univerzity Pardubice č. SD373001/82/30352 (2016).

- [1] Kaválek M.: *Místní provozní předpis – Vodní hospodářství, díl č. I. Teplárna Náchod – innogy Energo, s.r.o., Náchod 2014.*
- [2] Novotný L.: Užitný vzor PUV 2014-30527, č. 27969, Úřad průmyslového vlastnictví, Praha 2014.
- [3] Novotný L., Kočanová V., Kabutey A., Karásková A., Dušek L., Petráňková R., Mikulášek P.: *WASTE FORUM 2*, 117 (2018).

6P03**ÚLOHA SÍRANOV PRI DEGRADÁCII
TEXTILNÝCH A PAPIERENSKÝCH
FARBÍV ANODICKOU OXIDÁCIOU**Gabriela Kuchtová¹, Libor Dušek¹¹*Fakulta chemicko-technologická, Univerzita
Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice, ČR,
gabriela.kuchtova@student.upce.cz,
libor.dusek@upce.cz*

Cieľom tejto práce bolo posúdenie úlohy síranov pri čistení modelových odpadových vôd obsahujúcich syntetické farbivá na textil a papier. Jednalo sa o skupiny kyslých a priamych farbív, ktoré podľa chemickej štruktúry patria medzi aminoantrachinónové i azo zlúčeniny. Tieto látky prispievajú k organickému znečisteniu vôd, pretože ich vysoká stabilita, potrebná k zachovaniu stálosti zafarbenia, predstavuje problém pri degradácii. Navyše pri farbiacom procese textilných a papierových vlákien bývajú často pridávané anorganické soli vrátane síranov. Z tohoto dôvodu sa pre čistenie vôd javilo ako vhodné riešenie použitie nepriamej anodickej oxidácie. Z testovaných elektród poskytovala najlepšie výsledky bórom dopovaná diamantová elektróda. Jej použiteľnosť bola podrobnejšie skúmaná pri rôznych podmienkach ako rozdielne pH, počiatočná koncentrácia farbiva, prúdová hustota a pod. Skúmaný bol aj vplyv štruktúry cieľového kontaminantu na rýchlosť odfarbenia. V neposlednom rade bola zhodnotená nielen dekolizácia, ale aj možnosť degradácie farbív v prostredí síranov.

*Pod'akovanie za financovanie Študentskej Grantovej Súťaži 2021 (SGS_2021_003)***6P04****ADSORPCIA FARMACEUTÍK
Z ODPADOVÝCH VÔD POMOCOU
AKTÍVNEHO UHLIA**Daniela Pavúková¹, Lucia Fašková¹, Ladislav Štibrányi¹, Ján Híveš¹¹*Oddelenie anorganickej technológie, Radlinského 9,
812 37 Bratislava, daniela.pavukova@stuba.sk*

Každý rok sa spotrebujú tisícky ton farmaceutík pri liečbe ľudí a zvierat [1]. Tie sú vyvinuté tak, aby aj pri nízkej koncentrácii mali terapeutický účinok na organizmus a cieľové tkanivá. Práve táto vlastnosť farmaceutík predstavuje problém pri ich výskyte v životnom prostredí.

Na odstraňovanie farmaceutík zo životného prostredia sa v súčasnosti vyvíja mnoho metód. Patria medzi ne napríklad elektrokoagulácia,

elektroflotácia, pokročilé oxidačné procesy (procesy využívajúce UV žiarenie, procesy využívajúce ultrazvuk a i.) alebo adsorpcia. Táto práca sa zaoberá adsorpciou farmaceutík s použitím aktívneho uhlia. Skúmané farmaceutiká (diklofenak, karbamazepín, kofeín, difenhydramín hydrochlorid, sulfametoxazol, venlafaxín a cetirizín) boli vybrané na základe ich výskytu v odpadových vodách. Na skúmanie adsorpcie rôznych koncentrácií liečiv ((10, 2, 1) mg/L) boli použité štyri druhy komerčne vyrábaného uhlia s rôznou porozitou a špecifickým povrchom. Optimálny čas adsorpcie bol stanovený na 15 minút. Použitím aktívneho uhlia s najväčším špecifickým povrchom sa dosiahla 100 % účinnosť odstránenia diklofenaku a antihistaminík difenhydramín hydrochloridu a cetirizínu. V prípade antibiotika sulfametaxazol sa 100 % účinnosť odstránenia dosiahla pri použití aktívneho uhlia s najväčším objemom veľkých mikropórov a malých mezopórov.

Tento projekt bol podporený v rámci projektov OP VaV ITMS 26240120034, VEGA 1/0343/19, APVV-17-0183 a Grantu mladých výskumníkov v rámci Slovenskej technickej univerzity (ElCapFe).

[1] Xu Y.: Journal of Materials Chemistry A. 24, (2017).

6P05**POROVNANIE ÚČINNOSTI SORPČNÝCH
MATERIÁLOV PRI ODSTRÁŇOVANÍ
PÄŤMOCNÉHO ARZÉNU Z VODY**Ronald Zakhar¹, František Čacho², Ján Derco¹, Viliam Vretenár³¹*Oddelenie environmentálneho inžinierstva, Fakulta
chemickej a potravinárskej technológie STU
v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava,
ronald.zakhar@stuba.sk*²*Ústav analytickej chémie, Fakulta chemickej
a potravinárskej technológie STU v Bratislave,
Radlinského 9, 812 37 Bratislava*³*Centrum STU pre nanodiagnostiku, STU v Bratislave,
Vazovova 5, 812 43 Bratislava*

Arzénová kontaminácia povrchových a podzemných vôd predstavuje celosvetový problém [1]. Z tohto dôvodu je príspevok zameraný na využitie komerčne dostupných sorpčných materiálov (granulované aktívne uhlie Filtrasorb 300 – GAU, granulovaný prírodný zeolit – ZEO, železom pokrytý zeolit – ZEO-Fe, granulovaný oxid železitý – Bayoxide E33, granulovaný hydroxid železitý – GEH 101 a granulovaný oxihydroxid železitý – CFH 12) pri odstraňovaní päťmocného arzénu As(V) z modelových vôd.

Pre každý adsorbent bola stanovená jeho adsorpčná kapacita a účinnosť odstraňovania As(V), pričom ako najúčinnější adsorbent zo všetkých testovaných sa preukázal Bayoxide E33 s adsorpčnou kapacitou $493,0 \mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$ a adsorpčnou účinnosťou 98,60 %. Na zlepšenie adsorpčných vlastností GAU a ZEO bola vykonaná ich modifikácia železnatými iónmi pomocou viacstupňového procesu. V konečnom dôsledku bolo pripravené železom modifikované aktívne uhlie (Fe-GAU) s 11,29 % obsahom železa a železom modifikovaný zeolit (Fe-ZEO) s 9,13 % obsahom železa. RTG difrakčná analýza povrchu Fe-ZEO potvrdila prítomnosť oxidu železitého (Fe_2O_3) a SEM snímky povrchu Fe-GAU potvrdili miesta bohaté na železo. Z adsorpčných testov železom modifikovaných sorpčných materiálov vyplynulo, že najúčinnější bol Fe-GAU, ktorý dosiahol až 90,08 % účinnosť odstránenia As(V) už v priebehu 30 minút. V porovnaní s komerčným Bayoxide-om E33 došlo približne k trojnásobne väčšiemu naadsorbovanému množstvu As(V) za ten istý reakčný čas.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja, na základe zmluvy číslo APVV-17-0119. Autori zároveň ďakujú aj za finančnú podporu v rámci Grantovej schémy na podporu excelentných tímov mladých výskumníkov v podmienkach Slovenskej technickej univerzity v Bratislave.

[1] Weerasundara L., Ok Y.S., Bundschuh J.: *Environmental Pollution*, 268(B), 1–19 (2021).

6P06

SELEKTIVNÍ ODSTRAŇOVÁNÍ NEŽÁDOUCÍCH OXOANIONTŮ Z VODNÝCH ROZTOKŮ

Lenka Matoušková¹, Helena Parschová¹

¹Ústav energetiky, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, matouskl@vscht.cz

Vlivem zvýšené průmyslové činnosti se v životním prostředí objevují ve větším množství různé toxické a karcinogenní látky, které je potřeba z vod odstranit či snížit jejich koncentrace na přípustné hodnoty. Jednou z mnoha používaných technologií, pro jejich odstránění z vodného prostředí, je ionexová technologie.

Tato práce je zaměřena na selektivní odstránění oxoaniontů selenu IV a VI. Selen je nezbytným mikronutrientem pro živé organismy, ale při vyšších koncentracích, než je homeostáza, už je toxický¹. Maximální přípustná koncentrace selenu v pitné vodě je $10 \mu\text{g}/\text{l}$.²

K testování byly vybrány různé typy komerčně dostupných sorbentů za účelem selektivního odstránění oxoaniontů selenu z modelových roztoků, obsahujících různé doprovodné anionty (chloridy, dusičnany, sírany), které simulují reálné podmínky, a mohou ovlivnit sorpci oxoaniontů selenu. Kromě optimalizace sorpčních podmínek byla sledována i účinnost desorpce oxoaniontů selenu ze sledovaných sorbentů. Byly provedeny vsádkové experimenty, při kterých byla zjištěna pro každý sledovaný sorbent optimální hodnota pH pro odstránění jednotlivých oxoaniontů selenu a na základě těchto výsledků byly provedeny dynamické kolonové procesy.

Bylo zjištěno, že na odstránění selenu IV je vhodnější sorbent anorganického typu obsahující ionty železa (např. GEH, Arsen X-^{pp}) a na odstránění selenu VI je vhodné použít silně nebo slabě bazické anxy.

[1] U. S DEPARTMENT OF HEALTH AND HUMAN SERVICES. Toxicological profile for selenium. <https://www.atsdr.cdc.gov/ToxProfiles/tp92.pdf> (7. 7. 2021).

[2] Vyhláška č. 70/2018 Sb.

6P07

HYBRIDNÍ NANOČÁSTICE S ANORGANICKÝM JÁDREM A POLYMERNÍM OBALEM PRO BIOMEDICÍNU: PŘÍKLADY Z ÚMCH

Martin Hrubý¹

¹Ústav makromolekulární chemie AVČR, v.v.i., Heyrovského náměstí 2, 162 06 Praha 6, Česká republika, mhruby@centrum.cz, hruby@imc.cas.cz

Hybridní nanočástice s anorganickým jádrem a polymerním obalem spojují výhody anorganického jádra (např. pro magnetickou rezonanci, luminescenci, radioznačení, optickou a rentgenovou absorpci a reakci na vnější podněty) a biokompatibilního polymerního obalu (zajišťujícímu např. koloidní stabilitu, biokompatibilitu a cílení). Nanočástice mohou být biodegradovatelné (výhodné pro *in vivo*) nebo biologicky stabilní (výhodné pro *in vitro* / *ex vivo*).

Bude prezentováno několik příkladů takových systémů vyvinutých na ÚMCH:

- i) Nanočástice fytátu vápenatého dopovaného železitými ionty, volitelně potažené dextranem pro koloidní stabilizaci, pro ³¹P NMR detekci bakteriálních sideroforů, důležitých faktorů virulence těchto patogenů. Železité ionty slouží jako paramagnetický přepínač chelátovaný fytátem. V přítomnosti

sideroforů je železo vychelatováno, což lze výhodně sledovat na ^{31}P NMR signálu fyátu.

- ii) „Molekulární puzzle“ na bázi fotoluminescenčních nanočástic CaWO_4 dopovaných Ln^{3+} , které lze snadno pokrýt biokompatibilními přírodními polysacharidy přímou chelatací.
- iii) Fluorescenční nanodiamanty produkované extrémně rychlým isotropním ozařováním ionty generovanými *in situ* jadernou reakcí (štěpení ^{10}B neutrony) potažené polymerem cílícím na gliomové buňky. Je prokázána rychlá produkce fluorescenčních nanodiamantů v jaderném reaktoru a robustní postup potahování polymerem vedoucí k efektivnímu cílení do buněk gliomu *in vitro*.

Prezentované studie vznikly za finanční podpory Grantové agentury České republiky (grant č. 19-01438S), Ministerstva Školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (grant č. LTC19032) a Technologické agentury České republiky (grant č. KAPPA TO01000074).

6P08

ADSORPČNÍ STUDIE POLYFLUOROVANÉHO PROTIZÁNĚTLIVÉHO LÉČIVA FLUFENAMOVÉ KYSELINY NA UHLÍKATÝCH SORBENTECH

Barbora Kamenická¹, Tomáš Weidlich¹, Pavel Matějčíček¹

¹Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Skupina chemických technologií, 532 10 Pardubice, Česká republika, barbora.kamenicka@student.upce.cz

V současnosti byly stopy léčiv nalezeny v přírodních, a dokonce i v podzemních vodách. Z jejich výskytu v životním prostředí vyplývá, že biologický stupeň ČOV není schopen zcela odstranit tyto kontaminanty. Proto se hledají účinnější metody jejich odstranění z vod. Adsorpce je nejen účinnou technologií pro separaci organických látek z vod, ale i často aplikovanou metodou [1]. Aplikace komerčního aktivního uhlí je však spojena s vysokými provozními náklady. Z tohoto důvodu bylo studováno i použití levnějšího adsorbentu biocharu, který se vyrábí pyrolýzou z ekonomicky nenáročného vstupní biomasy (zemědělský odpad, čistírenský kal) bez následné aktivace [2]. Ovšem biochar často nedosahuje účinnosti odstranění organických polutantů jako aktivního uhlí. Existují však možnosti

impregnace uhlíkatých sorbentů, což vede k navýšení sorpčních kapacit. Jednou možností impregnace je využití cenově dostupných iontových kapalin [3].

Tento příspěvek řeší srovnání adsorpce protizánětlivého léčiva Flufenamové kyseliny na uhlíkaté sorbenty – aktivní uhlí a biochar. Tato adsorpční studie dále zahrnuje adsorpční kinetiky a adsorpční izotermy adsorpce Flufenamové kyseliny na biochar a biochar impregnovaný vybranými iontovými kapalinami.

Poděkování za financování Studentské Grantové Soutěži 2021 (SGS_2021_003).

- [1] Chaudhry G. R., Chapalamadugu S.: *Microbiol. Rev.* 55, 59 (1991).
- [2] Hameed B. H., Din A. M., Ahmad A. L. J.: *Hazard. Mater.* 141, 819 (2007).
- [3] Kamenická B., Weidlich T., Matějčíček P., Pohořelý M., v knize: *Applications of Biochar for Environmental Safety*, kap. 12, str. 206. OpenTech, Londýn 2020.

6P09

VPLYV PODMIENOK SPRACOVANIA NA ZNIŽOVANIE OBSAHU CHOLESTEROLU V MLIEKU A SMOTANE POMOCOU BETA-CYKLODEXTRÍNU

Lukáš Kolaric¹, Peter Šimko¹

¹Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU, Ústav potravinárstva a výživy, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, lukas.kolaric@stuba.sk

Kardiovaskulárne ochorenia (CVD) patria k najčastejším príčinám mortality ľudí na svete, pričom najviac frekventovaný mechanizmus vzniku CVD pozostáva vo zvyšovaní obsahu lipidov v krvi, najmä celkového cholesterolu a lipoproteínov s nízkou hustotou (LDL) [1]. Nakoľko mlieko a mliečne výrobky obsahujú vysoké hladiny cholesterolu a sú konzumované vo veľkej miere, tak znižovanie cholesterolu v týchto výrobkoch môže zohrávať významnú úlohu v redukcii CVD. Cieľom práce bolo nájsť vhodné podmienky spracovania mlieka a smotany s beta-cykloextrínom, keďže práve aplikácia beta-cykloextrínu je považovaná za najvhodnejšiu pre znižovanie cholesterolu v mliečnych výrobkoch za súčasného zachovania ich organoleptických a výživových hodnôt. Spracovanie vzorky zahrňovalo kroky miešania, usadenia komplexu cholesterol-beta-cykloextrín a nakoniec jeho odstránenie zo vzorky pomocou odstreďovania. Obsah zvyškového cholesterolu sa stanovil pomocou HPLC s UV detekciou [2]. Z výsledkov práce sa zistilo, že miera

odstraňovania cholesterolu je významne ovplyvňovaná podmienkami miešania (rýchlosťou, časom a teplotou) a tiež podmienkami odstreďovania (rýchlosťou a časom). Významný vplyv mal aj čas usadenia komplexu cholesterol-beta-cyklohextrín. Po optimalizácii uvedených podmienok bolo možné odstránenie cholesterolu až do takmer 99%. Preto, táto metóda potvrdila výbornú možnosť produkcie bezcholesterolového mlieka a rôznych ďalších mliečnych výrobkov a tak obohatiť trh s potravinami.

Táto práca bola podporená Operačným programom integrovanej infraštruktúry v rámci projektu: Dopytovo-orientovaný výskum pre udržateľné a inovatívne potraviny Drive4SIFood 313011V336 spolufinancovaným z Európskeho fondu regionálneho rozvoja.

[1] Pereira P.C.: *Nutrition*, 30, 619-627 (2014).

[2] Kolarič L., Šimko P.: *Foods*, 9, 1378 (2020).

6P10 NOSIČE LÉČIV NA BÁZI AMFIFILNÍCH KOPOLYMERŮ

Vít Herynek¹, Lenka Loukotová², Tomáš Heizer^{1,3},
Tereza Bělinová³, Martin Hrubý²

¹Centrum pokročilého preklinického zobrazování (CAPI), 1. lékařská fakulta, Univerzita Karlova, Salmovská 3, 120 00 Praha 2, vit.herynek@lf1.cuni.cz

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

³Ústav patologické fyziologie, 1. lékařská fakulta, Univerzita Karlova, U Nemocnice 5, 12853 Praha 2

Amfifilní kopolymery nacházejí uplatnění v řadě aplikací, v poslední době zejména v medicíně. Jednou ze zajímavých aplikací je tvorba micel pro dopravu hydrofobních léčiv, například protinádorových. Samotné kopolymery mohou podstatným způsobem ovlivnit působení léčiva zeslabením či zesílením mnohočetné rezistence buněk k lékům (tzv. multi-drug resistance – MDR). Ve studii jsme se zaměřili na toxicitu a MDR efekt vybraných blokových a gradientních amfifilních kopolymerů.

Byly připraveny blokové a gradientové amfifilní kopolymery hydrofilního (2-methyl-2-oxazolin, MeOx) a hydrofobních (2-fenyl-2-oxazolin - PhOx, 2-(4-butylfenyl)-2-oxazolin - BuPhOx respektive 2-(4-butoxyfenyl)-2-oxazolin - BuOPhOx) monomerů. Následně byly tyto kopolymery testovány *in vitro* na buněčných liniích. Toxicita byla ověřena na buněčné linii lidských dermálních fibroblastech pomocí MTT testu. MDR efekt byl testován měřením viability buněk v přítomnosti polymeru a doxorubicinu.

Testované polymery vykázaly zanedbatelnou cytotoxicitu do koncentrace 1 mg/mL s výjimkou kopolymerů PMeOx₇₀-*block*-BuPhOx₃₀ a kopolymerů BuOPhOx, v jejichž přítomnosti klesla viabilita na 75 %.

Polymery PMeOx₇₀-*block*-BuPhOx₃₀ a PMeOx₇₀-*block*-BuOPhOx₃₀ indukují rezistenci buněk a snižují tak účinek přidaného doxorubicinu, zatímco PMeOx₉₀-*grad*-PhOx₁₀ a PMeOx₉₀-*block*-PhOx₁₀ naopak rezistenci buněk vůči doxorubicinu snižují. V obou případech je efekt silně závislý na koncentraci přidaných polymerů.

Studie prokázala zásadní vliv struktury polymerů na jejich biologické působení, který je nezbytné brát v úvahu při navrhování potenciálně účinných nosičů protinádorových léčiv.

Studie vznikla za podpory GAČR (grant 19-01602S), Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR (Projekt LM2015062 Czech-BioImaging) a Evropského fondu pro regionální rozvoj (CZ.02.01./0.0./0.0./16_013/0001775 - OPVVV projekt).

6P11 FLUORINATED DISELENIDE BASED SELF ASSEMBLY NANOPARTICLES FOR CANCER TREATMENT

M. Vetrík^{1,2}, L. Kobera¹, R. Konefal¹, J. Kucka¹, V. Lobaz¹, E. Pavlova¹, J. Brus¹, G. Pratz², M. Hrubý¹

¹Institute of Macromolecular Chemistry, Czech Academy of Sciences, Heyrovsky Sq. 2, 162 06 Prague 6, Czech Republic, vetrík@seznam.cz

²Stanford University, Stanford School of Medicine, Stanford, California 94305, USA

Hypoxia-related resistant cancer cells represent one of the main challenges in cancer treatment. Aggressive cancer cells were exposed to novel fluoralkylated diselenide molecules based on seleno-L-cystine (17FSe₂). The fluorinated chains at 17FSe₂ underwent self-assembled formation process that results in nanoparticles which fluorine core showing increased oxygen-carrying features. We showed that redox-active diselenide autocatalytically decomposes hydrogen peroxide (H₂O₂) and oxidizes the intracellular regulator of oxidative stress glutathione (GSH). The application of 17FSe₂ may lead to a decrease in the chemo- and radiosensitivity of cancer cells cultivated under ≤ 5% O₂. Alkylfluorinated diselenide nanoparticles functionalized with a short polyethylene oxide chain with terminal amino groups applied to cancer cells showed a significant increase in cytotoxic effect. The hypoxic cancer cells treated with 17FSe₂

following short oxygen pretreatment (30 min before RT) showed a potent radiosensitizing effect. Fluorinated diselenide nanoparticles have the potential to cause an intracellular redox imbalance in cellular redox systems, resulting in an increased cancer cytotoxic effect and overcoming the sensitivity of cancer cells. These features were utilized in the treatment of aggressive, highly metastatic cancer cells (MDA-MB-231 and EL4 using mouse model). These implications may lead to new approaches in the treatment of hypoxic tumors in oncology.

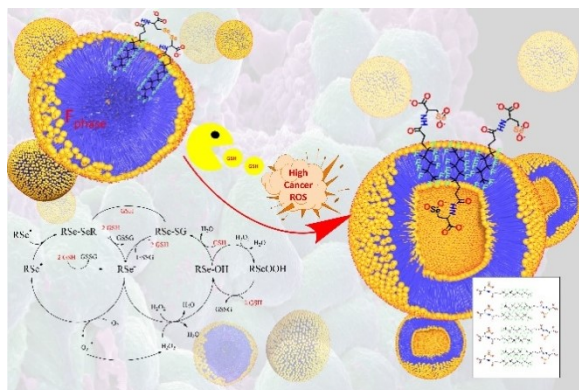


Fig. 1 Fluorinated diselenide nanoparticles under ROS environment

The authors Thank to Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (grant # LTC19032) and to Czech Science Foundation (grant # 19-01602S).

6P12 LIPIDOVÉ A POLYMERNÍ NANOČÁSTICE PRO DOPRAVU DERIVÁTŮ NAFTOCHINONŮ JAKO POTENCIÁLNÍ LÉČIVA LUPÉNKY A NÁDORŮ

Tereza Ulrichová^{1,2}

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

²Katedra fyzikální a makromolekulární chemie, PřF
UK, Hlavova 8, 128 00 Praha 2, Česká republika
E-mail: ulrichova.terka@gmail.com

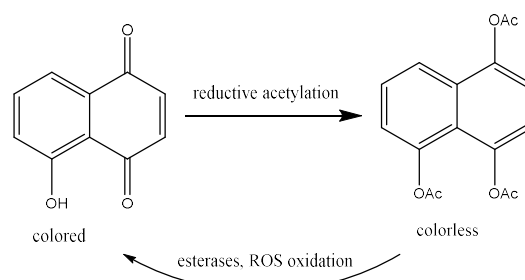
V důsledku dysregulace kožního imunitního systému a narušení funkce kůže jako ochranné bariéry se mohou potencovat autoimunitní kožní onemocnění jako například psoriáza (lupénka). Psoriáza se projevuje šupinatými kožními lézemi nacházejícími se hlavně na pokožce hlavy a v kloubech záhybech. Histologicky je charakterizována nadměrnou proliferací a aberentní diferenciací keratinocytů, angiogenezí a zánětlivou infiltrací leukocytů do dermis (škáry). Mechanismus patogeneze na molekulární úrovni není ještě plně popsán, ale ukazuje se, že

se pravděpodobně jedná o kombinaci genetických a epigenetických faktorů (prostředí, životní styl, stres, ...).

Farmakologické přístupy zahrnují lokální léčbu (kortikosteroidy), fototerapii (UVB a UVA), či systémovou léčbu methotrexátem a cyclosporinem A.

Přístupy, které budou prezentovány, jsou založené na použití naftochinonů jako bioaktivních molekul, které cílí na buňky, které se nekontrolovaně dělí (nádorové buňky, hyperproliferující keratinocyty). Byly navrženy dva koncepty:

- i) Lipidové nanočástice s bezbarvými proléčivými (redukovanými acetylovanými deriváty juglonu a shikoninu). Dle předpokladu by se měly v intracelulárním prostředí deacetylovat esterasami a zpětně oxidovat reaktivními formami kyslíku, které jsou v zánětlivých buňkách ve vyšších koncentracích, na původní naftochinony.



- ii) Polyhydrazonové nanočástice založené na kovalentní vazbě bioaktivního shikoninu či juglonu. Tyto nanočástice by měly být snadno hydrolyzovatelné v mírně kyselém pH, které je typické pro nádorové buňky a postižené keratinocyty, na netoxický dihydrazid kyseliny sebakové a příslušné bioaktivní molekuly.

Prezentované studie vznikly za finanční podpory Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (grant č. LM2015064 ERIC).

Autoři děkují za finanční podporu Grantové agentuře České republiky (grant č. 21-04166S).

6P13
**PHOSPHOROTHIOATE GROUPS-
 CONTAINING POLYMER AS A
 PIONEERING METAL-FREE CONTRAST
 AGENT FOR ³¹P-MRI**

Lucie Woldřichová^{1,2}, Natalia Ziłkowska^{3,4}, Richard Laga¹, Ladislav Androvič¹, Iveta Klimánková¹, David Červený³, Martin Vít^{3,5}, Petr Pompach⁶, Rafał Konefal¹, Olga Janoušková⁷, Martin Hrubý¹, Daniel Jiráček^{3,8}

¹Ústav makromolekulární chemie, AV ČR, v.v.i.,
 Heyrovského nám. 2, Praha 6,
 woldrichova@imc.cas.cz

²The University of Chemistry and Technology, Prague,
 Technická 5, 166 28 Prague, Czech Republic

³Institute for Clinical and Experimental Medicine,
 Vídeňská 1958/9, 140 21 Prague, Czech Republic

⁴First Faculty of Medicine, Charles University,
 Kateřinská 1660/32, 121 08 Prague, Czech Republic

⁵Faculty of Mechatronics Informatics and
 Interdisciplinary Studies, Technical University of
 Liberec, Hájkova 917, 461 17 Liberec, Czech Republic

⁶Institute of Biotechnology, Czech Academy of
 Sciences, Průmyslová 595, 252 50 Vestec, Czech
 Republic

⁷Jan Evangelista Purkyně University in Ústí nad
 Labem, Faculty of Science, Pasteurova 1, 400 96 Ústí
 nad Labem, Czech Republic

⁸Faculty of Health Studies, Technical University of
 Liberec, Studentská 1402/2, 461 17 Liberec, Czech
 Republic

³¹P-MR is an important diagnostic technique currently used to assess tissue metabolites, but it can also be advantageously utilized to visualize internal body structures. However, due to the extremely low physiological level of phosphorus-containing biomolecules, it is necessary to use an exogenous contrast agent to take advantage of this capability. Herein, we describe the synthesis and MR characterization of a pioneering metal-free ³¹P-MR contrast agent based on phosphorus-bearing polymer. Poly[O-(2-(methacryloyloxy)ethyl) O-(2-(trimethylammonium)ethyl) phosphorothioate] (pTMPC) is a well-defined hydrophilic nanomaterial characterized by a high content of naturally rare phosphorothioate groups providing a high-intensity ³¹P-MR signal distant from the phosphorus biomolecules, making it easily distinguishable from biological background both in vitro and in vivo. Furthermore, pTMPC is prone to oxidation in the presence of reactive oxygen species, which is also detectable by ³¹P-MR. Add to this the favorable ¹H and ³¹P T1/T2 relaxation times and biocompatibility, pTMPC represents a conceptually new contrast agent, whose discovery

opens up new possibilities in the field of ³¹P-MR imaging.

This work was supported by the Czech Science Foundation [project no. 19-08176S]; the Ministry of Education, Youth and Sport of the Czech Republic [project no. LTAUSA18173]; the Ministry of Health of the Czech Republic [project no. NU20-08-00095].

6P14
**HYBRID POLYMER-COLLOID SYSTEMS
 AS MRI-DETECTABLE NANOCARRIERS
 FOR VACCINE DELIVERY**

Richard Laga¹, Lucie Woldřichová,¹ Ladislav Androvič¹, Michal Babič¹, Monika Pařová¹, Marcela Filipová¹, David Červený², Daniel Jiráček²

¹Institute of Macromolecular Chemistry, Czech
 Academy of Sciences, Heyrovského nám. 2, 162 06
 Prague, Czech Republic, laga@imc.cas.cz

²Institute for Clinical and Experimental Medicine,
 Vídeňská 1958/9, 140 21 Prague, Czech Republic,
 daniel.jirak@ikem.cz

Diverse macromolecular delivery systems have been developed to increase the stability and potency of subunit vaccines, but many have inappropriate size and morphology to ensure efficient interaction of antigens with immune cells and accumulate in the body after performing their function. To overcome these limitations, we introduced novel biocompatible polymer-colloidal carriers based on maghemite (γ -Fe₂O₃) nanoparticles coated with poly[N-(2-hydroxypropyl)methacrylamide] (PHPMA) polymers. Various types of PHPMA polymers (semitelechelic homopolymers, statistical copolymers and di-block copolymer) were attached to the surface of γ -Fe₂O₃ particles via an iron-chelating deferoxamine group linked to the ends of their chains through stable or stimuli-responsive bonds. The resulting materials were stable, well-defined nanoparticles characterized by negligible toxicity and suitable hydrodynamic size and shape for efficient uptake by immune cells; those having polymers attached via stimuli-responsive bonds exhibited rapid decoating upon being incubated in the solutions mimicking reductive environment inside the cells. In addition, the favorable magnetic properties of the nanoparticles enabled their detection by MRI, which can be used to monitor their pharmacokinetics. Finally, a minimal peptide immunogen derived from the HIV-1 binding site (V3) was successfully conjugated to exemplary polymer-colloid systems to demonstrate their suitability for vaccine delivery.

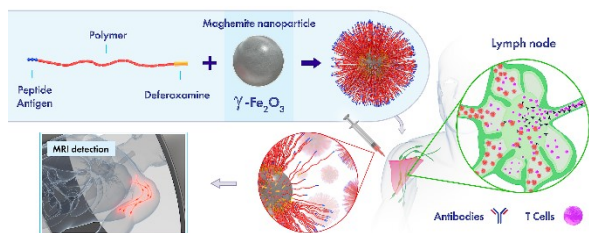


Fig. 1 Scheme of preparation and clinical use of polymer-colloid theranostics.

This work was supported by the Czech Science Foundation [project no. 19-08176S]; the Ministry of Education, Youth and Sport of the Czech Republic [project no. LTAUSA18173]; the Ministry of Health of the Czech Republic [project no. NU20-08-00095].

6P15

PĚT LET SPOLUPRÁCE ÚMCH S 1. LF UK (CAPI), POŽADAVKY NA VZORKY PRO *IN VIVO* TESTOVÁNÍ

Jan Kučka¹, Martin Hrubý¹, Petr Štěpánek¹, Luděk Šeřec², Pavla Poučková³

¹Ústav makromolekulární chemie Akademie věd České republiky, v.v.i., Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6, Česká republika, e-mail: jkucka@centrum.cz

²Centrum pokročilého preklinického zobrazování (CAPI), 1. lékařská fakulta UK v Praze

³Ústav biofyziky a informatiky, 1. lékařská fakulta UK v Praze

Zkušenosti získané v průběhu dlouholeté spolupráce na řešení společných projektů Ústavu makromolekulární chemie Akademie věd České republiky a Centra pokročilého preklinického zobrazování 1. Lékařské fakulty Univerzity Karlovy v Praze jsou prezentovány v příspěvku představujícím nové zobrazovací technologie a instrumentaci, tak i upřesňující požadavky na vzorky pro *in vitro* a *in vivo* biologické testování polymerů pro biomedicínu. Požadavky na pro úspěšnou spolupráci jsou jak fyzikálně-chemické a biologické na straně vzorku, tak i legislativní a ekonomické při vlastní přípravě experimentu. Poznatky vycházejí ze spolupráce obou ústavů zajišťované hlavním autorem osobně.

Autor děkuje za finanční podporu Grantové agentuře České republiky (granty č. 19-01602S a 19-01438S).

6P16

SULFOBETAINE-BASED POLYDISULFIDES WITH TUNABLE UPPER CRITICAL SOLUTION TEMPERATURE (UCST) IN WATER ALCOHOLS MIXTURE

Jozef Kollár¹, Anton Popelka², Jaroslav Mosnáček¹, Peter Kasák²

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

New sulfobetaine-based polydisulfide polymers were synthesized and showed tunable, fully repeatable and reversible UCST behavior in water and in mixtures containing different alcohols (methanol, ethanol, isopropanol). The upper critical solution temperature (UCST) in a solution with modification of the polymeric backbone to a polydisulfide structure affected UCST behavior. Decreasing polarity and/or increasing alcohol percentage in the water mixtures induced an increase in the cloud points of the polymers in the solutions. Thermoresponsive behaviour were repeatable and fully reversible with negligible hysteresis from aggregate to unimer state. Further, derivatives allows depolymerization by simple triggers such as naturally abundant thiolated derivatives or sunlight. Additionally, surface wettability can be tuned by polymerization time and thickness on a polydisulfide modified Si-wafer. The combination of zwitterionic polymers being used as a benchmark for nonbiofouling materials, the modularity of naturally source-derived disulfides and the responsiveness of stimuli to the depolymerization process, together with the tunable wettability of surfaces, suggest avenues for utilization of such materials for stimuli-responsive materials and vectors of particular species in biomedical and bioengineering applications [1,2].

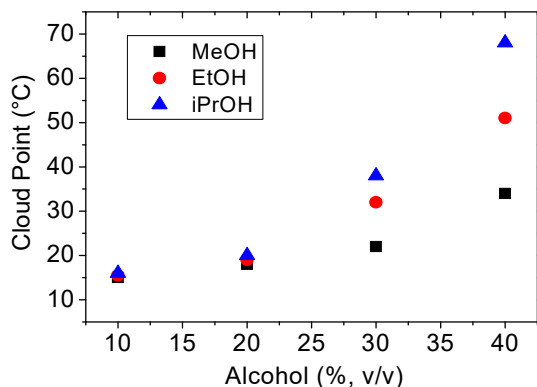


Fig. 1: The plot of cloud point vs. percentage of alcohol (MeOH—black squares, EtOH—red circles, iPrOH—blue triangles, solid symbols—heating, outline symbols—cooling) in water for polydisulfide.

Acknowledgements: Authors thank for financial support to APVV grant agency through grant no. APVV-19-0338 APVV-19-0465.

- [1] R. Singh, G.M. Whitesides, *J. Am. Chem. Soc.* 112 (1990)
 [2] L.Y. Zhou, *Comput. Struct. Biotechnol. J.* 18 (2020)

6P17

AKCELERÁTORY NA BÁZI ŽELEZA PODÍLEJÍCÍ SE NA VYTVRZOVÁNÍ NENASYCENÝCH POLYESEROVÝCH PRYSKYŘÍČ PŘI TEPLOTĚ OKOLÍ

Eliška Matušková¹, Jan Honzíček¹, Jaromír Vinklárěk²

¹Ústav chemie a technologie makromolekulárních látek, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, studentská 573, 532 10 Pardubice

²Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice

Vytvrzování nenasyčených polyesterových pryskyřic (UPR) probíhá radikálovou kopolymerací se styrenem. K vytvoření těchto styrenových mŕstvků je nutný přídavek iniciátoru. Pro urychlení procesu rozpadu iniciátoru a tak i tvorbě styrenového radikálu jsou do systému přidávány tzv. akcelerátory [1]. Nejčastěji se jedná o komplexy přechodných kovů, u kterých snadno dochází k jednoelektronovému přenosu. Mezi nepoužívanější patří v dnešní době 2-ethyl hexanoát kobaltnatý. V posledních letech se setkáváme s požadavky na jeho nahrazení. Důvodem je jeho karcinogenní potenciál [2].

Účinky akcelerátorů na bázi železa byly studovány na komerčním systému UP/STY/MEKP doporučeným výrobcem, aby byly zachovány identické podmínky vytvrzování. U těchto akcelerátorů byla stanovena doba gelace

a vytvrzovací charakteristika. Ke sledování kinetiky vytvrzovacího procesu, byla využita časově rozlišená infračervená spektroskopie. Výsledná data byla porovnána s komerčním 2-ethyl hexanoátem kobaltnatým.

Tato práce vznikla za podpory Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (UPA SG311007).

- [1] Mleziva, J., Šňupárek, J.: *Polymery*. Praha: Sobotáles, 2000. ISBN 80-85920-72-7.
 [2] Simpson, N., Maaijen, K., Roelofsen, Y., Hage, R.: *Catalysts*. 9, 825 (2019).

6P18

CONTROLLED ENCAPSULATION AND RELEASE BY CHARGE REGULATION AND MULTIVALENT INTERACTIONS WITH SUPRAMOLECULAR POLYMER CARRIERS

Hanna Zhukouskaya, Zulfriya Černochová, Marcela Filipová, Miroslav Vetrík, Martin Hrubý, Peter Černocho, Miroslav Šlouf, Jiří Pánek

Institute of Macromolecular Chemistry, Czech Academy of Sciences, Heyrovského nám. 2, 162 06 Prague 6, Czech Republic, cernochova@imc.cas.cz

In order to produce a biodegradable biocompatible well-defined nanoencapsulator of polycationic cargos, a series of modified anionic glycogens were synthesized by acylation of oyster glycogen with selected dicarboxylic acid anhydrides, possessing different hydrophobicity (bicyclo[2,2,2]-2,3:5,6-dibenzo-2,5-octadiene-7,8-dicarboxylic, 1,2-cyclohexanedicarboxylic, phthalic and succinic anhydrides). TEM imaging demonstrated that modification of glycogen took place in whole volume of the particles. Self-assembly behavior was studied with DLS as a function of solution temperature and pH. DLS autotitration with model cationic amphiphile cargo – honeybee poison peptide melittin in buffered solution revealed that melittin-modified glycogen polyplex formation occurs in the solution in the ratio 1/3, and survives further increasing of melittin concentration up to 1/9.8 weight ratio. Zeta potential increases from -30 mV to almost 0 mV. This points out a great complex-formation ability of modified glycogens. In vitro experiments on erythrocytes clearly showed that modified glycogens efficiently suppress hemolytic activity of melittin serving as melittin antidotes or may, in opposite use, serve as controlled release carriers. DLS, SLS and TEM characterized the size of resulting complex as 800-900 nm, molecular weight and density of the

particles depends on ionization degree, kind of precursor and its length.

The authors acknowledge financial support from Czech Science Foundation (grants # 19-10429S and 21-04166S).

6P19 MECHANICAL AND VISCOELASTIC PROPERTIES OF NOVEL FULLY BIODEGRADABLE PLA/PHB BLENDS FILLED WITH KERATIN

Katarína Mosnáčková¹, Alena Opálková Šišková¹,
Angela Kleinová¹, Martin Danko¹, Jaroslav Mosnáček¹

¹*Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences,
Dubravská Cesta 9, 845 41 Bratislava, Slovakia.
upolkaty@savba.sk*

The interest for fully biodegradable “green” materials in society is increased mainly due to accumulation of plastic waste in landfills and its penetration and contamination whole ecosystem [1]. Biodegradable materials easily undergo enzymatic hydrolysis and they are prone to natural recycling by biological processes [2].

Here, novel composites based on biodegradable blends consisting of poly(lactic acid) (PLA) and poly(3-hydroxybutyrate) (PHB), and filled with hydrolysed keratin with loading from 1 to 20 wt. % were prepared and their properties were studied. Mechanical and viscoelastic properties were characterized by tensile test, DMTA and rheological measurements. Addition of acetyltributyl citrate (ATBC) as plasticizer significantly affected the mechanical properties of the materials. It was found that filled PLA/PHB/ATBC composite at the highest keratin loading exhibited similar shear moduli compared to un-plasticized blend as result of much stronger interactions between keratin and polymer matrix in comparison to composites with lower keratin loading. Changes in dynamic moduli for PLA/PHB/ATBC blend filled with keratin depended extensively on keratin loading. Softening interactions between keratin and polymer matrix resulted in lower glass transitions temperature and reduced polymer chain mobility. The developed keratin-based composites possess properties comparable to commonly used thermoplastics applicable for example as packaging materials.

This research was supported through project VEGA 2/0019/18 and 1/0751/21, APVV 18-0420, and SAS-MOST JRP2019/07.

[1] Mosnáčková K., Opálková Šišková A., Kleinová A., Danko M., Mosnáček J.: *International Journal*

of Molecular Sciences. 21(24), 9678 (2020).

[2] Mosnáčková K., Šlošár M., Kollár J., Janigová I., Opálková Šišková A., Chmela Š., Sikorska W., et al.: *European Polymer Journal*. 114, 81 (2019).

6P20 VLASTNOSTI A ŠTRUKTÚRA P3HB-CO- 4HB STRÚN PRE 3D TLAČ

Zdenko Špitalský¹, Mária Kováčová¹, Adriana Kovalčík²

¹*Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 845 41
Bratislava, zdeno.spitalsky@savba.sk*

²*Ústav chemie potravín a biotechnológií, Fakulta
chemická, Vysoké učení technické v Brně, Purkyňova
464/118, Královo Pole, 61200, Brno*

FDM je proces aditívnej výroby, ktorý umožňuje vytvárať vysoko presné komplexné trojrozmerné objekty pre širokú škálu aplikácií. Princípom FDM je extrúzia roztavenej struny, postupné ukladanie vrstiev a ich tuhnutie. Potenciálne aplikácie vo farmaceutických a lekárskech odboroch si vyžadujú vývoj biodegradovateľných a biokompatibilných termoplastov na spracovanie strún. V tejto práci sa skúmal potenciál strún z poly(3-hydroxybutyrát-ko-4-hydroxybutyrátu) (P3HB-co-4HB) pre FDM z hľadiska ich tepelnej stability. Reologické a mechanické vlastnosti kopolyméru sa upravili pridaním zmäkčovadiel alebo zmiešaním s PLA. Tepelná stabilita zmesi bola študovaná pomocou termogravimetrickej analýzy a reologických analýz sledovaním časovo závislých zmien komplexnej viskozity vzoriek taveniny. Plastifikácia P3HB-co-4HB mierne bránila jeho tepelnej degradácii, ale najlepší stabilizačný účinok sa zistil v prípade kopolyméru zmiešaného s PLA. Celkovo reologické, tepelné a mechanické vlastnosti preukázali, že plastifikovaný P3HB-co-4HB je potenciálny kandidát biodegradovateľného polyméru pre FDM procesy.

Štúdia bola finančne podporená projektom VEGA 2/0051/20 (ZŠ a MK) a interným projektom Vysokého učení technického v Brne FCH-S-21-7483 (AK).

[1] Adriana Kovalcik et al.: *Int J Biol Macromolecules*. 183, 880-889 (2021)

6P21

NOVÉ PRÍSTUPY K DEACIFIKACII A KONZERVÁCII CELULOZOVÝCH OBJEKTOV KULTÚRNEHO DEDIČSTVA

Radko Tiňo¹, Katarína Vizárová¹, Milan Králik², Soňa Malečková¹, Jana Jurišová³

1 Oddelenie dreva, celulózy a papiera, FCHPT STU, Radlinského 9/1111, 812 15 Bratislava

2 Oddelenie organickej technológie, katalýzy a ropy, FCHPT STU, Radlinského 9/1111, 812 15 Bratislava

3 Oddelenie anorganickej technológie, FCHPT STU, Radlinského 9/1111, 812 15 Bratislava

Degradácii a stabilizácii (ligno)celulóзовých materiálov je venovaná dlhodobá pozornosť. Napriek dlhoročnému výskumu a využívaniu deacidifikačných postupov, založených na aplikácii nerozpustných anorganických častíc v nosnom médiu, je nutné konštatovať nedostatky v ich účinnosti. Deacidifikačné látky musia byť prítomné počas celej doby životnosti materiálu v tých miestach mikroštruktúry, kde dochádza k degradácii celulózy, t.j. nielen na povrchových ale aj vo vnútorných oblastiach. Hlavnými problémami sú (1) nerovnomerná distribúcia alkalických látok v mikroštruktúre, (2) neustále generovanie reaktívnych kyselín, (3) súčasné metódy merania, ktoré neumožňujú stanovenie mikro-distribúcie pH a alkalické rezervy v priečnom reze papiera.

Je prekvapením, že napriek rozsiahlemu využívaniu hydrotalkitov ako deacidifikačných činidiel v oblasti stabilizácie polymérov, informácie o aplikácii na deacidifikáciu papiera sú len v malom rozsahu. Možným dôvodom je prítomnosť hliníka v ich vrstevnatej štruktúre (všeobecný vzorec $[M_2+(1-x)M_3+x(OH)_2](An-x/n) \cdot mH_2O$, pomer obsahu dvojmocného katiónu k trojmocnému je v rozmedzí 2 až 4). Hliník sa vo výrobe papiera používal pri kyslom živiciťnom glejení avšak jeho nevýhodou je katalytický účinok pri tvorbe kyselín, zodpovedných za kyslú hydrolyzu celulóзовých reťazcov (Jablonský, 2021), ktorý sa však prejavuje iba v kyslej oblasti pH (Baty, 2010). V porovnaní so štandardne používanými časticami MgO, by mal hydrotalkit ľahšie prenikať do objemu porézneho celulóзовého materiálu, osobitne v prípade nanočastíc.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe Zmluvy č. APVV-18-0155.

[1] Baty et al.: Deacidification for conservation, *BioResources*, 5(3), 1-69 (2010).

[2] Jablonský, m., Šima, J., Lelovský, Marek: Considerations on factors influencing the degradation of cellulose in alum-rosin sized paper.

Carbohydrate Polymers, 245. s. 1--7. (2021).

6P22

MECHANOCÉMIA: EFEKTÍVNY NÁSTROJ NA PREMENU ODPADOV NA FUNKČNÉ MATERIÁLY

Matej Baláž¹

¹ Ústav geotechniky SAV, Watsonova 45, 04001 Košice, balazm@saske.sk

Mechanochémia využívajúce nástroje vysokoenergetického mletia je skvelý environmentálne prijateľný prostriedok na recykláciu odpadu pre ich opätovné použitie vo funkčných materiáloch. Na túto problematiku existuje mnoho vedeckých štúdií aj viaceré prehľadných článkov, avšak väčšina sa zameriava na daný typ odpadu. Vo všeobecnosti možno štúdie rozdeliť do troch veľkých skupín podľa druhu spracúvaného odpadu, konkrétne na spotrebiteľský, technogénny a agro-odpad. Prvá kategória zahŕňa najmä elektronický kovový a polymérny odpad. Do skupiny technogénnych odpadov možno zaradiť popolček, produkty spaľovania tuhého komunálneho odpadu, metalurgické trosky, či odpadové kaly. Posledná skupina zahŕňa biomasu a škrupiny na báze uhličitanu vápenatého. So spracovaním vaječného odpadu má výskumná skupina autora bohaté skúsenosti [1,2]. V rámci prezentácie budú poslucháčom priblížené príklady spracovania vybraných druhov odpadu pomocou mechanochémie. Autor tohto príspevku tento rok publikoval na túto tému monografiu [3] a jej hlavná myšlienka je schematicky zobrazená na Obr. 1.



Obr. 1 Mechanochémia ako efektívny nástroj transformácie odpadov na funkčné materiály

Autor oceňuje podporu akcie COST CA18112: Mechanochémia pre obnoviteľný priemysel (www.mechsustind.eu). Túto prácu podporila aj Slovenská agentúra pre výskum a vývoj na základe

zmluvy č. APVV-18-0357 a Slovenská grantová agentúra VEGA (projekt 2/0044/18).

- [1] Baláž, M., Ficeriová, J., Briančin, J.: *Chemosphere*, 146, 458 (2016).
 [2] Baláž, M.: *Adv. Colloid Interface Sci.* 256, 256 (2018).
 [3] Baláž, M.: *Environmental Mechanochemistry: Recycling Waste into Materials Using High-Energy Ball Milling*. Springer-Nature, 621 s (2021).

6P23

AKO DOSIAHNUŤ ANTIBAKTERIÁLNY ÚČINOK POLYMÉRNÝCH (NANO)KOMPozITOV POMOCO U SVETLA?

Mária Kováčová¹, Zdenko Špitálský¹

¹Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava 45, m.kovacova@savba.sk

Hrozba šírenia baktérií rezistentných voči viacerým liekom a výskytu nozokomiálnych infekcií je v súčasnosti jednou z najväčších biologických hrozieb 21. storočia. Vynakladá sa veľa úsilia a peňazí na výskum a vývoj nových liečiv, metód a materiálov, ktoré by účinne bojovali proti takýmto rizikám alebo im predchádzali. Pozornosť sa upriamuje aj na širokú škálu materiálov a nanočastíc, ktoré by sa mohli použiť na výrobu antibakteriálnych látok, povrchov, lekárskeho prístrojov a i. Vyvinuli sme nový typ antibakteriálnych nanočastíc - hydrofóbne uhlíkové kvantové bodky (hCQDs). Ich hlavnou výhodou je jednoduchá miešateľnosť s polymérnymi matricami, čím sa výrazne rozširuje oblasť ich použitia. Majú unikátne fyzikálno-chemické a antibakteriálne vlastnosti a sú schopné produkovať reaktívne formy kyslíka za kontrolovateľných podmienok pomocou princípu fotodynamické terapie. Ak sa hCQDs použijú ako (nano)plnivo do polymérnej matrice, môže vytvoriť stabilný antibakteriálny materiál, ktorý nedegraduje a je vhodný na modifikáciu takmer všetkých povrchov. Môže sa použiť hlavne na výrobu antibakteriálnych okien, podláh, stien, povrchových úprav nábytku a iného vybavenia miestností, kde sú vyžadované vysoké hygienické štandardy (nemocnice, potravinársky priemysel, ultračisté miestnosti). Ďalšou zaujímavou aplikáciou je použitie polymérneho (nano)kompozitu pri výrobe zdravotníckych pomôcok, najmä močových a obličkových katétrov, alebo náplastí na ošetrovanie rán a bradavíc [1, 2, 3].

Podakovanie: Autori sú vďační za finančnú podporu Ministerstva školstva Slovenskej republiky, Slovenskej

akadémie vied, grantu VEGA 2/0051/20 a projektu COST CA16217 ENIUS.

- [1] Kováčová, M. et al. *ACS Biomater. Sci. Eng.*, 4, 3983–3993 (2018).
 [2] Kováčová, M. et al. *J. Photochem. Photobiol. B*, 211, 112012 (2020).
 [3] Marković, Z., Kováčová, M. et al. *Photodiagnosis Photodyn. Ther.* 26, 342-349 (2019).

6P24

INFLUENCE OF LANTHANUM OXIDE NANOPARTICLES ON THE USEFUL PROPERTIES OF A WATERBORNE COATING BINDER BASED ON SELF-CROSSLINKING ACRYLATE LATEX

Denisa Steinerová¹, Andréa Kalendová¹, Jana Machotová¹

¹Institute of Chemistry and Technology of Macromolecular Materials, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Czech Republic; steinerovadenisa@gmail.com

This paper deals with the simple preparation of an environmentally friendly binder for sanitary interior applications, namely polymeric acrylate dispersions (latex) containing La₂O₃ nanoparticles as functional components to achieve antimicrobial properties, but also to improve physical and mechanical properties and chemical resistance. The incorporation of uncoated powdered nanoparticles was performed during the synthesis by a two-step emulsion polymerization technique to obtain latexes containing 0.5–1.3% La₂O₃ nanoparticles relative to the monomers. The properties of this new latex binder were compared with the properties of a reference system (without nanoparticles) synthesized by the same route. The results revealed that the new latexes containing lanthanum nanoparticles provided coating films with increased resistance to solvents and water bleaching, which at the same time have significant antimicrobial activity against all tested bacterial and fungal strains. The results of all tests provided evidence of the superiority of polymer dispersions with lanthanum nanoparticles over the reference system (without nanoparticles), while the useful properties increased with increasing concentration of La₂O₃ nanoparticles.

6P25
WATERBORNE HYGIENIC COATINGS
BASED ON SELF-CROSSLINKING
ACRYLIC LATEX WITH EMBEDDED
INORGANIC NANOPARTICLES: A
COMPARISON OF NANOSTRUCTURED
ZNO AND MGO AS ANTIBACTERIAL
ADDITIVES

Jana Machotová¹, Andréa Kalendová¹, Denisa Steinerová¹

¹ Faculty of Chemical Technology, Institute of Chemistry and Technology of Macromolecular Materials, University of Pardubice, Studentská 95, 53210 Pardubice, Czech Republic, jana.machotova@upce.cz

This paper deals with a facile fabrication of environmentally friendly hygienic coatings based on acrylic latex comprising embedded inorganic nanoparticles originating from nanostructured ZnO and MgO, respectively, in the role of antibacterial agents. The incorporation of surface-untreated powdered nanostructured oxides into the latex was performed during the latex synthesis carried out by a two-step emulsion polymerization technique. With this technological approach, latexes comprising dispersed inorganic nanoparticles in the content of ca 0.5 – 1.1 wt. % (based on solids) were successfully prepared. For obtaining high-performance coating films, keto-hydrazide self-crosslinking chemistry was introduced into latexes. The antibacterial efficiency of the coatings was evaluated concerning the type and concentration of incorporated nanoparticles. It was determined that all the latex coating compositions containing inorganic nanoparticles exhibited long-term storage stability and provided smooth transparent coating films of enhanced solvent and water resistance due to the combination of covalent and ionic interfacial crosslinking. The latex films displayed significant antibacterial activity, which was more pronounced with the increased content of nanoparticles. It was also found that the addition of nanostructured MgO enabled significant savings of a commercial biocidal additive while maintaining high antibacterial efficiency.

6P26
SKÚMANIE POVÝBUCHOVÝCH SPLODÍN
PYROTECHNICKÝCH VÝROBKOV V
PÔDE

Zuzana Melichová¹, Ivana Majerčáková², Jozef Kobza^{1,3}

¹Fakulta prírodných vied, Univerzita Mateja Bela, Tajovského 40, 974 01 Banská Bystrica, zuzana.melichova@umb.sk

²El spol. s.r.o., Radlinského 17A/1575, 052 01 Spišská Nová Ves

³NPPC – Výskumný ústav pôdoznanectva a ochrany pôdy, Mládežnícka 36, 974 04 Banská Bystrica

Pôda patrí k hlavným prírodným zdrojom a v dôsledku environmentálnych problémov dochádza k jej fyzikálnemu, chemickému a biologickému poškodeniu a znehodnoteniu. Medzi príčiny poškodenia pôd patrí najmä veterná a vodná erózia, zhutnenie, acidifikácia, ale aj kontaminácia rizikovými látkami, ktoré spôsobujú jej znehodnotenie a zníženie biologickej aktivity.

Príspevok sa venuje elementárnej analýze pôdy za účelom stanovenia obsiahnutých povýbuchových splodín pre potreby kriminalistickej identifikácie a kontaminácii pôdy povýbuchovými splodinami [1-3]. V práci sa analyzovalo 6 druhov vzoriek pôd, ktoré boli odobraté pred a po výbuchu guľových bômb, zároveň sa analyzovali aj 3 druhy zaistených vzoriek povýbuchových zvyškov z guľových bômb.

Na prvkovú elementárnu analýzu zaistených chemických a pyrotechnických stôp (pôda, povýbuchové zvyšky) sa využívali vybrané analytické metódy (F - AAS, HG - AAS, ICP - AES, TOC analýza, odmerné metódy). Pri analýzach vzoriek pôd sa postupovalo podľa záväzných metodík rozborov pôd.

Zistili sme, že výbuch výrobkov zábavnej pyrotechniky ovplyvňuje do určitej miery obsahy mikroelementov a makroelementov v pôde.

Ďakujeme Mjr. Radoslavovi Michalicovi z Oddelenia pyrotechniky Kriminalistického a expertízneho ústavu PZ v Bratislave a Ing. Jurajovi Hanuščinovi z Oddelenia spektroskopie a pevných materiálov z El spol. s.r.o. Spišská Nová Ves, za ich cenné rady a pomoc pri vzniku tohto príspevku.

Tento príspevok vznikol vďaka finančnej podpore projektu KEGA 028UMB-4/2019.

[1] Kurucz, J.: *Chémia výbušnín*. Banská Bystrica : Belianum – Vydavateľstvo UMB. 2018. 113 s. ISBN 978-80-557-1403-5.

[2] Martín-Alberca, C., García-Ruiz C.: *Trends Anal.*

Chem., 56, 27 (2014).

- [3] Azhagurajan, A., Selvakumar, N.: *Process Saf Environ Prot*, 92, 732 (2014).

6P27

EXCHANGE COUNTERION IN POLYCATIONIC HYDROGELS: TUNABILITY OF HYDROPHOBICITY, WATER STATE AND FLOATING CAPABILITY

Martin Danko¹, Zuzana Kronekova¹, Igor Krupa², Jan Tkac³, Peter Kasak²

¹ *Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, Slovak Republic; martin.danko@savba.sk (M.D.); zuzana.kronekova@savba.sk (Z.K.);*

² *Center for Advanced Materials, Qatar University, P.O. Box 2713 Doha, Qatar; igor.krupa@qu.edu.qa (I.K.); peter.kasak@qu.edu.qa (P.K.).*

³ *Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovak Republic; jan.tkac@savba.sk*

Smart gel materials are capable to control and switch swelling, water state and wettability properties by triggered by external stimuli. In this study [1], we fabricated series of polyelectrolyte hydrogels bearing 3-trimethylammoniumpropyl pendant to methacrylamide-based backbone and examined switchability with hydrophobic-like counteranions. Exchange between initial chloride and camphor sulfate (CaS), dodecyl sulfate (DS) and perfluorooctanoate (PFO) counterions was investigated. Kinetics of exchange showed fast exchange within 4 hours for PFO resulted in favorable coordination for ion pairing resulting and decreasing of hydration. Reversibility of exchange to Cl⁻ ion was enable only for CaS ion due to bulkiness while PFO and DS hydrogel were unable to exchange even by using tetrabutylammonium chloride as structurally similar reagent due to aggregation or coagulates in collapsed state of counterions linear tails. Hydrogels exhibited modulable water state, water swelling. Moreover, hydrogel containing DS and PFO as counterion showed surface hydrophobic (contact angle 90°) and high hydrophobic (110°) behavior, respectively. Raman spectrometry and fluorescence study with pyrene probe indicates increase of strong hydrogen-bonded water molecules, water confinement, and hydrophobic domains in PFO hydrogel. Moreover, PFO modified hydrogel demonstrates free-floating ability on water surface with strong water repellency that is applied for pH detection

floating device enable distinguish applied base based on volatility.

The authors thank Grant Agency VEGA for support through project nr. 2/0168/21. This study was performed during the implementation of the project Building-up Centre for advanced materials application of the Slovak Academy of Sciences, ITMS project code 313021T081 supported by Re-search & Innovation Operational Programme funded by the ERDF. This publication was supported by Qatar University Grant IRCC-2020-004.

- [1] Danko, M., Kronekova, Z., Krupa, I., Tkac, J., Matuš, P., Bujdoš, M., AlMaadeed, M.A., Kasak, P.: *Gels*, 7, (2021) submitted.

6P28

INTERACTIONS BETWEEN OLIGOPEPTIDES AND CHARGED STAR POLYMERS INVESTIGATED BY ADVANCED ANALYSIS OF (LIFETIME) CORRELATION SPECTROSCOPY

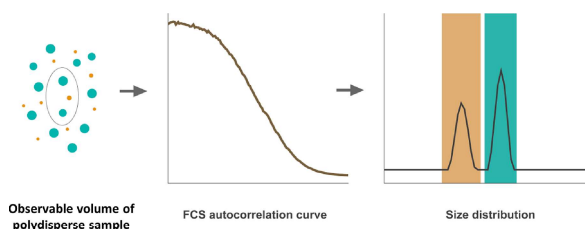
Jiří Pánek¹, Petr Štěpánek¹, Peter Černocho¹, Peter Košován², Martin Hrubý¹

¹ *Institute of Macromolecular Chemistry AS CR, Heyrovsky Sq. 2, 162 06 Prague 6, Czech Republic, panek@imc.cas.cz*

² *Faculty of Science of the Charles University, Hlavova 2030/8, 128 43 Prague 2, Czech Republic.*

Fluorescence correlation spectroscopy (FCS) provides most commonly values of diffusion coefficients of fluorescently labeled species in solutions, especially biopolymers. A newly developed procedure for the determination of diffusion coefficient distributions applicable to polydisperse polymers or nanoparticles, based on the well-known CONTIN algorithm, is described and tested on both simulated FCS correlation functions and real experimental data. Good resolution of bimodal distributions is observed and it is quantitatively established how the resolution depends on the level of experimental noise. Effects of incorrect calibration of the focal volume on the obtained diffusion coefficient and its distribution are described for single-focus FCS.

The developed technique was tested and used for evaluation of experimental data examining interactions between oligopeptide sequences (weak ampholytes) with star-like polymers (polyelectrolytes) in order to explore charge-controlled self-assembly of these compounds. The results contribute to rational design of supramolecular self-organization process exploiting variable ionization of weak acid and base groups.



Financial support was provided by the GA CR - Czech Science Foundation (grant # 19-10429S).

6P29

FLUORIDOVÉ TERČOVÉ MATRICE PRO STANOVENÍ ^{236}U URYCHLOVAČOVOU HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIÍ

Tomáš Prášek¹, Mojmír Němec¹, Marcus Christl², Philip Gautschi², Christof Vockenhuber²

¹Katedra jaderné chemie, FJFI ČVUT v Praze, Břehová 7, 115 19, Praha 1

²Laboratory of Ion Beam Physics, ETH Zurich, Otto-Stern-Weg 5, 8093 Zürich, Switzerland
E-mail: tomas.prasek@fffi.cvut.cz

Izotop uranu ^{236}U patří v současnosti mezi již zavedené nástroje izotopové analýzy, k jejichž měření je vzhledem ke stopovým koncentracím ve výchozích přírodních vzorcích využívána urychlovačová hmotnostní spektrometrie. Stanovení tohoto radionuklidu nalézá uplatnění zejména v oblastech jaderné bezpečnosti a forenzních analýz, kde je využíván jakožto spolehlivý a vysoce citlivý stopovač lidské jaderné činnosti, umožňující krom charakterizace případné emise rovněž identifikaci typu jejího zdroje. Uplatnění jako stopovač však nalézá stále častěji i ve výzkumu přírodních procesů, zejména pak v oceánografii a hydrologii při monitorování mořských proudů. V současnosti jsou pro stanovení ^{236}U nejčastěji využívány oxidické matrice, v nichž je uran zpravidla inkorporován v krystalické struktuře oxidu železitého. Vhodnou alternativou, slibující možnost dosažení řádově vyšší citlivosti, se pak ukazují být nově vyvíjené fluoridové materiály. V rámci probíhajícího výzkumu v této oblasti byl dále optimalizován dříve vyvinutý postup přípravy fluoridových terčových materiálů založený na redukcí a spolusrážení uranu z kyselých roztoků společně s fluoridy lanthanoidů, vystupujících v roli neizotopického nosiče. Analýzou vzorků prostřednictvím AMS MILEA ve spolupráci s ETH Zürich byla prokázána možnost reprodukovatelného dosažení vysokých iontových výtěžků, s velmi slibnými výsledky bylo provedeno rovněž jedno z vůbec prvních měření izotopových poměrů $^{236}\text{U}/^{238}\text{U}$ s využitím fluoridových matic.

Tento výzkum je součástí projektu RAMSES (CZ.02.1.01/0.0/0.0/16_019/0000728)

6P30

TESTOVÁNÍ FLUORIDOVÝCH TERČOVÝCH MATRIC PRO STANOVENÍ ^{26}Al METODOU AMS

Kateřina Fenclová¹, Tomáš Prášek¹, Mojmír Němec¹, Marcus Christl², Philip Gautschi², Christof Vockenhuber²

¹Katedra jaderné chemie, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT, Břehová 7, 115 19 Praha 1, katerina.fenclova@fffi.cvut.cz

²Laboratory of Ion Beam Physics, ETH Zürich, 8093 Zürich, Switzerland

V rámci výzkumu terčových matic pro urychlovačovou hmotnostní spektrometrii (AMS) bylo testováno použití fluoridových materiálů pro stanovení kosmogenního izotopu hliníku, ^{26}Al , které má praktické využití pro stanovení stáří meteoritů a hornin, v astronomii pro mapování věku hvězd či v paleoklimatických studiích pro datování polárního ledu [1]. Tento kosmogenní radionuklid s dlouhým poločasem rozpadu je metodou AMS běžně stanovován v poměru vůči stabilnímu izotopu ^{27}Al v matici Al_2O_3 . Fluoridové terčové matrice mají značný potenciál vzhledem k možnostem dosažení vyšších hodnot iontových proudů oproti běžně používaným oxidickým maticím. Pro jejich otestování byl připraven materiál na bázi kryolitu (Na_3AlF_6), který byl analyzován systémem AMS MILEA v Laboratory of Ion Beam Physics, ETH Zürich, a to jednak ve směsi s PbF_2 z důvodu zvýšení iontových proudů a MgF_2 pro odhalení tvorby molekulárních iontů isobarického ^{26}Mg . Dle provedených hmotnostních skenů byl určen nejintenzivnější proudový pík obsahující hliník, $^{27}\text{AlF}_4^-$, jemuž odpovídá relativní molekulová hmotnost 103 AMU. Ten byl následně injektován do urychlovače a pomocí Faradayových detektorů ve vysokoenergetické části byly zjištěny hodnoty iontových výtěžků měřených matic. Signál $^{26}\text{Al}^{2+}$ byl detekován plynovým ionizačním detektorem, jehož měření však bylo zatíženo interferencí hořčíku.

Tato práce vznikla za podpory projektu Nr. CZ.02.1.01/0.0/0.0/16_019/0000728: RAMSES

[1] W. Kutschera, AMS – from DNA to astrophysics, EJP Web of Conferences 63, 03001 (2013)

6P31
VYUŽITIE STANOVENIA ^{129}I
URÝCHĽOVAČOVOU HMOTNOSTNOU
SPEKTROMETRIOU VO FORENZNEJ
ANALÝZE

Miriám Mindová¹, Martin Daňo¹, Mojmír Němec¹

¹*Katedra jaderné chemie, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT, Břehová 78/7, 115 19 Praha 1, miriam.mindova@jfifi.cvut.cz*

Jadrová forenzná analýza sa zaoberá zisťovaním pôvodu jadrových materiálov nájdených mimo regulačnej kontroly. Každý materiál obsahuje iné množstvo a druhy rádionuklidov, ktoré sú charakteristické pre daný typ materiálu. Toto jedinečné zloženie a charakteristické parametre sa využívajú k identifikácii neznámych vzoriek, bývajú vďaka svojej unikátnosti označované ako „odtlačky prstov“.

Jedným zo stanovovaných rádionuklidov je ^{129}I , ktorého hlavná časť v životnom prostredí pochádza z jadrovej činnosti človeka, najmä z únikov zo zariadení na spracovanie vyhoreného jadrového paliva či testov jadrových zbraní [1]. Taktiež je to užitočný izotop pre datovanie veku, vhodný oceánografický stopovač, rovnako ako užitočný environmentálny indikátor na skúmanie cyklu stabilného jódu.

Na stanovenie ^{129}I sa používa urýchľovačová hmotnostná spektrometria (AMS) [2], ktorá je

schopná detegovať veľmi malé izotopické pomery. V rámci projektu RAMSES, ktorého súčasťou je aj FJFI, bolo v Řeži vybudované nové laboratórium s AMS typu MILEA [3], na ktorom budú vzorky merané.

Jód v prírode existuje hlavne v stopových množstvách, preto je potrebné ho pred meraním najprv oddeliť od vzorky. Samotná separácia jódu je náročná úloha, keďže ide o prchavé formy jódu. Jeho prchavosť v oxidačnom stave 0 a vo forme organických jóduvaných látok významne komplikuje dosiahnutie vysokých výťažkov separácie a ovplyvňuje hodnotu výsledku vzhľadom k špeciálnej frakcionácii.

Tento príspevok bol financovaný Operačným programom VVV č. CZ.02.1.01/0.0/0.0/16_019/0000728 – Výzkum ultrastopových izotopů a jejich využití v sociálních a environmentálních vědách urychlovačovou hmotnostní spektrometrií.

- [1] Hou, X., Hansen, V., Aldahan, A., et al.: *Anal. Chim. Acta.* 632(2), 181-196 (2009).
- [2] Hellborg, R., Skog, G.: *Mass Spectrom. Rev.* 27(5), 398-427 (2008).
- [3] Ionplus AG, Dostupné online www.ionplus.ch (2021).

PREDNÁŠKY - SEKCIA 7
CHEMPROGRESS – CHEMICKÉ
TECHNOLÓGIE

7P01

**ZLEPŠENÍ VÝKONU ALKALICKÉ
ELEKTROLÝZY VODY S VYUŽITÍM
ANION SELEKTIVNÍ MEMBRÁNY
MODIFIKOVANÉ NEPLATINOVÝMI
KATALYZÁTORY**

Michaela Plevová¹, J. Hnát¹, J. Žitka², M. Paidar¹, K. Bouzek¹

¹ Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav anorganické technologie, Technická 5, 166 28 Praha 6, ČR, plevovam@vscht.cz, +420 220 444 009

² Ústav makromolekulární chemie Akademie věd ČR v.v.i., Heyrovského nám. 2, 16206 Praha

V současné době roste ve společnosti zájem o snižování emisí skleníkových plynů. Z tohoto důvodu jsou k elektrické síti častěji připojovány obnovitelné zdroje elektrické energie, které způsobují kolísání v množství elektrické energie dodávané do rozvodné sítě. Nadbytečná elektrická energie z těchto zdrojů však může být v kombinaci s elektrolýzou vody využita k výrobě vodíku nezátíženého emisemi CO₂. Vodík pak může být využit v době sníženého výkonu obnovitelných zdrojů k zpětné výrobě elektrické energie.

Membránová alkalická elektrolýza vody (MAEV) nabízí možnost pracovat s cenově dostupnými materiály, jako je nerez ocel, nikl nebo železo. S využitím anion selektivní membrány jako separátoru elektrodových prostor je možné elektrolyzér provozovat v tzv. „zero-gap“ uspořádání, což vede ke snížení ohmických ztrát. Výhodou je také možnost nanesení katalyzátorů přímo na membránu – CCM (z angl. catalyst coated membrane), kdy je zlepšen kontakt mezi membránou a katalyzátorem.

Cílem práce je ověření možnosti zlepšení výkonu MAEV s využitím přístupu CCM. Porovnány jsou membrány z blokového kopolymeru s 1,4-diazabicyclo[2.2.2]oktanovými funkčními skupinami o tloušťkách 200 a 60 μm s komerční membránou Fumasep FAA-3-50. Porovnány byly zátěžové křivky, polarizační odpory, odpor cely a byl proveden test stability.

Získané výsledky naznačují, že s optimalizovanou CCM je možné dosáhnout zlepšení výkonu MAEV.

Poděkování:

Financováno za podpory Technologické agentury České republiky v rámci projektu č. TK 02030001.

Tento výstup vznikl v rámci projektu Specifického vysokoškolského výzkumu – projekt č. A2_FCHT_2021_051.

[1] Keegstra K., Plant Physiol. 2010, 54: 483-486.

[2] Carpita NC. & Gibeaut DM., Plant J. 1993, 3:1-30.

7P02

**Ni-Fe A Ni-W ELEKTROKATALYZÁTORY
VÝVOJA VODÍKA**

Jana Záchenská, Matilda Zemanová

Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU v Bratislave, Oddelenie anorganickej technológie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, jana.zachenska@stuba.sk

Primárnym zdrojom energie sú v súčasnosti fosílné palivá. Negatívnym aspektom je ich postupné vyčerpávanie a produkcia oxidu uhličitého pri ich spaľovaní. Z týchto dôvodov sa hľadajú vhodné alternatívy, ktoré by dokázali účinne nahradiť fosílné zdroje. Jedným z perspektívnych riešení je koncept vodíkovej ekonomiky, ktorý je založený na vodíku ako nosiči energie [1]. Vodíková ekonomika však vyžaduje udržateľné zdroje energie a efektívne technológie. Technológiou na výrobu vodíka je v koncepte vodíkovej ekonomiky alkalická elektrolýza vody [2]. Problémom alkalickej elektrolýzy vody je jej nízka účinnosť, ktorá sa dá zvýšiť používaním katalyzátorov [3].

Študovala sa príprava a elektrochemické vlastnosti Ni-W a Ni-Fe elektrokatalyzátorov vývoja vodíka. Katalytické vlastnosti pripravených materiálov sa kvantifikovali v zero-gap elektrolyzéri pre alkalickú elektrolýzu vody. Ako substrát sa používala 3D niklová pena, na ktorú sa pomocou galvanického pokovovania vylučovali povlaky. Vlastnosti pripravených vzoriek sa skúmali pomocou niekoľkých analýz (SEM, XRD, EDX, XPS). Porovnávala sa účinnosť pripravených katalyzátorov s ohľadom na ich stabilitu.

Z porovnaní pripravených dvojzložkových katalyzátorov na základe krátkodobých záťažových meraní možno povedať, že katalyzátory Ni-Fe dosahujú lepšie katalytické vlastnosti ako Ni-

W. Katalyzátory Ni-W dosahujú vyššiu stabilitu v skúmaných podmienkach.

Táto práca vznikla s podporou projektu VEGA 1/0747/21.

- [1] Szali N.: *ChemSusChem* 3, 1332 (2020)
- [2] Buttler A., Spliethoff H.: *Renew. Sustain. Energy Rev.* 82, 2440 (2018)
- [3] Salonen L.M., Petrovykh D.Y., Kolen'ko Y.V.: *Mater. Today Energy* 11-12, 100060 (2021)

7P03

VLIV KONCENTRACE KOH NA PROVOZ ALKALICKÉ ELEKTROLÝZY VODY: POROVNÁNÍ ANION-SELEKTIVNÍ MEMBRÁNY A PORÉZNÍ DIAFRAGMY

Karel Denk¹, Roman Kodým¹, Jaromír Hnát¹, Jan Žitka², Martin Páidar¹, Karel Bouzek¹

¹Ústav anorganické technologie VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika; denkk@vscht.cz

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

Současná průmyslová alkalická elektrolýza vody je provozována za vysokých koncentrací a teplot kapalného roztoku KOH (20 – 30 hm.%, 70 – 90 °C), s porézním separátorem elektrodových komor. Případné spojení elektrolýzy vody s obnovitelnými zdroji elektrické energie však vyžaduje technologii schopnou zrychleného spuštění. Je tedy vhodné pracovat s nižšími teplotami (25 – 50 °C) a koncentracemi KOH (<15 hm.%). Odpor porézního separátoru je však výrazně ovlivněn koncentrací elektrolytu. Za těchto podmínek tak může být vhodnější využít nový typ separátoru – anion-selektivní membránu.

Za podmínek průmyslové alkalické elektrolýzy vody vykazoval nejlepší vlastnosti porézní separátor [1]. Za nižších koncentrací a teplot kapalného elektrolytu ukázaly výsledky potenciál anion-selektivních membrán.

V této práci jsou porovnávány anion-selektivní membrána a porézní diafragma za nízkých koncentrací a teplot kapalného elektrolytu. Porovnání probíhalo na svazku cel pro alkalickou elektrolýzu vody vlastní výroby. Jako separátory byly zvoleny porézní diafragma Zirfon PerI™ UTP 500 a experimentální homogenní anion-selektivní membrána tvořená řetězcem poly(styren-ethylen-butyleen-styren) funkcionalizovaným skupinami 1,4-diazabicyclo[2.2.2]oktan. Tato membrána byla vyvinuta na ÚMCH AV ČR [2]. Výsledky potvrzují vhodnost použití anion-selektivní

membrány v systému s nízkými teplotami a koncentracemi kapalného elektrolytu. Porézní diafragma dosahuje výsledků srovnatelných s membránou při koncentraci 15 hm.% KOH a 40 °C.

Tento výstup vznikl v rámci projektu Specifického vysokoškolského výzkumu – projekt A1 FCHT_2021_004 a projektu European Union's Horizon 2020 research and innovation programme (GA No 862509).

- [1] Brauns, J.: *Journal of the Electrochemical Society.* 168, 1, (2021) 014510.
- [2] Hnát, J.: *Electrochimica Acta.* 248 (2017) 547.

7P04

KATODOVÝ KATALYZÁTOR NICOP PRO ALKALICKOU ELEKTROLÝZU VODY: STRUKTURNÍ A ELEKTROCHEMICKÁ CHARAKTERIZACE

Martin Ďurovič¹, Jaromír Hnát¹, Karel Bouzek¹

¹Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav Anorganické Technologie, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika, Durovica@vscht.cz

Kombinace alkalické elektrolýzy vody (AWE) s obnovitelnými zdroji energie (OZE) se dostává do popředí vědeckého zájmu díky možnosti ekologické konverze elektrické energie na chemickou energii vodíku. Jelikož byla AWE původně navržena pro dlouhodobý stabilní provoz, výše zmíněná kombinace s OZE klade na proces nové nároky (vyšší účinnost a flexibilita). Jednou z možností, jak zlepšit účinnost procesu, je nalezení dostupného katalyzátoru s dobrou stabilitou a katalytickou aktivitou pro reakci vývoje vodíku v alkalickém prostředí. Mezi perspektivní materiály lze v současné době zařadit fosfidové sloučeniny niklu.

Cílem této práce byla příprava a charakterizace neplatinového katalyzátoru NiCoP. Syntéza byla provedena katodickou elektrodepozicí na niklový nosič. Nanášecí roztok obsahoval NiCl₂·6H₂O, CoCl₂·6H₂O a NaH₂PO₂·H₂O. Sledován byl vliv koncentrace jednotlivých složek roztoku na výsledné složení (SEM-EDS, XPS a TEM) a katalytickou aktivitu katalyzátoru (Tafelova analýza). Strukturní analýza prokázala, že dochází ke vzniku materiálu s více fázemi. Výsledné složení a aktivita katalyzátoru tak může být ovlivněna změnou složení nanášecího roztoku. Výsledky elektrochemické charakterizace prokázaly, že NiCoP představuje perspektivní katalyzátor pro reakci vývoje vodíku. Pro jeho další využití bude důležité (i) identifikovat katalyticky aktivní fáze, (ii) ověřit

dlouhodobou stabilitu v alkalickém prostředí a (iii) využít katalyzátor při přípravě katalytické vrstvy katody pro alkalický elektrolyzér vody.

Tento výstup vznikl v rámci projektu Specifického vysokoškolského výzkumu (AI_FCHT_2021_004) a projektu European Union's Horizon 2020 research and innovation programme (GA No 862509).

7P05

NÁVRH TECHNOLOGIE ENERGETICKÝCH MATERIÁLŮ V AUSTIN DETONATOR

Lhotka M.¹, Mastný L.², Musil T.³, Vala R.³

¹VŠCHT Praha, Ústav anorganické technologie,

Technická 5, Praha 6-Dejvice, 166 28,

Tel.: +420220445019, e-mail:

Miloslav.Lhotka@vscht.cz

²VŠCHT Praha, Ústav anorganické chemie, Technická 5, Praha 6-Dejvice, 166 28, Tel.: +420220445019,

³Austin Detonátor s.r.o., Vsetín, ČR

Společnost AUSTIN DETONATOR je tradičním výrobcem rozbušek pro průmyslové trhací práce a v České republice zahájila svou činnost v roce 1999 odkoupením výroby rozbušek z bývalé Zbrojovky Vsetín. Jednou z hlavních složek rozbušky je třaskavina, která se většinou, z hlediska bezpečnosti, vyrábí přímo v místě kompletace rozbušek. Historicky používané třaskaviny: fulminát rtuťnatý, azid olovnatý, pikraminan olovnatý, trinitrorezorcinát olovnatý a 1-(5-tetrazolyl)-3-guanyl-tetrazen hydrát, současným ekologickým požadavkům již neodpovídají. Proto se již několik let usilovně pracuje na náhradách výše uvedených sloučenin. Na vývoji této ekologicky přijatelné třaskaviny, dlouhodobě spolupracuje s firmou Austin Detonator VŠCHT Praha. V letech 2012 až 2014 byly provedeny laboratorní testy možné přípravy této ekologické třaskaviny. Postupně se zvyšovalo množství vyrobené látky, přešlo se z laboratorních nádob do čtvrtprovozní aparatury a začali se řešit i problémy technologické, jako je výběr sušárny, znečistlivění produktu umožňující objemové dávkování a další nezbytné části technologického systému. Na základě těchto výzkumů byla v letech 2015–2016 postavena poloprovozní jednotka na výrobu této třaskaviny, již kapacitně v řádech stovek gramů. V roce 2017 se začala vybírat lokalita k výstavbě budovy pro výrobu „green“ třaskaviny a byl vypracován „basic design“ této technologie. V letech 2018–2019 se zahájilo projektování a výroba technologických komponentů. Dle plánů firmy Austin Detonator by nová výrobní jednotka mohla zahájit provoz v roce 2022.

7P06

PLYNOVĚ-DIFÚZNÍ VRSTVA A JEJÍ ROLE V PROVOZNÍCH CHARAKTERISTIKÁCH PALIVOVÉHO ČLÁNKU TYPU PEM

Monika Drakselová, Veronika Rečková, Martin Prokok a Karel Bouzek

Ústav anorganické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 16628 Praha 6, Česká republika, karel.bouzek@vscht.cz

Nízkoteplotní palivové články s protonově vodivou membránou, využívající vodík jako palivo a vzdušný kyslík jako oxidovadlo, představují perspektivní zdroje elektrické energie s širokou oblastí použití zejména v mobilních aplikacích. Významnou, byť často opomíjenou, konstrukční složkou palivového článku představují tzv. plynově-difúzní vrstvy plnicí v kontaktu s katalytickou vrstvou na povrchu membrány úlohu distributoru reaktantů, odvodu produktů a sběrače elektrického proudu. Přes významnou roli plynově-difúzní vrstvy v provozních charakteristikách palivových článků jsou informace o této komponentě dostupné v literatuře velmi omezené. Uvedená skutečnost významně limituje přesnost návrhu a optimalizaci konstrukce palivového článku s využitím metod matematického modelování. Cílem prezentované studie je prohloubit stupeň poznání v dané oblasti a doplnit chybějící informace o permeabilitě co nejširšího spektra komerčně dostupných plynově-difúzních vrstev. Tohoto cíle bylo dosaženo kombinací pokročilých metod matematického modelování s extenzivní experimentální studií. Dosažené výsledky představují významný přínos zejména pro pracoviště věnující se vývoji vlastních palivových článků a optimalizaci jejich geometrie pro požadované provozní podmínky.

Tento výzkum byl financován v rámci projektu „Palivové články s nízkým obsahem platiny“ registrovaným pod číslem CZ.02.2.01/0.0/0.0/16_025/0007414 financovaného z EFRR.

7P07

POROVNÁNÍ RŮZNÝCH KATALYZÁTORŮ PRO PEM PALIVOVÉ ČLÁNKY A OPTIMALIZACE JEJICH DEPOZICE NA MEMBRÁNU METODOU ULTRAZVUKOVÉHO NANÁŠENÍ

Jakub Malíš¹, Veronika Marková¹, Olívia Čobejová¹,
Martin Páidar¹, Karel Bouzek¹

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

Podobně jako v případě elektromobilů patří mezi materiály spadající do kategorie kritických zdrojů lithium a kobalt, tedy prvky nezbytné pro výrobu lithium-iontových baterií, je u vozidel využívajících technologii palivových článků klíčovým kritickým prvkem platina. Z toho důvodu je nezbytné snížit nezbytnou náložku na hodnotu přibližně 3 g na svazek. Ta odpovídá množství platiny využívané v katalyzátoru instalovaném ve výfukových cestách automobilů poháněných vznětovým motorem. Jednou z možností jak tohoto cíle dosáhnout představuje použití slitinových katalyzátorů. Vedle snížení náložky platiny je obvykle použito dalšího prvku rovněž doprovázeno zvýšením katalytické aktivity platiny.

Cílem této studie bylo porovnání katalytické aktivity a stability komerčně dostupných platinových katalyzátorů s rovněž komerčně dostupnými slitinovými katalyzátory a následně s experimentálním, nově vyvinutým katalyzátorem na bázi platiny nesené oxidem ceričitým. Funkce srovnávaných katalyzátorů byla studována in-situ v laboratorním palivovém článku typu PEM. Studované katalyzátory byly naneseny na povrch protonově selektivní polymerní membrány za použití ultrazvukem dispergovaného katalytického inkoustu metodou horké podložky. Výjimku představoval poslední případ platiny nesené oxidem ceričitým. V tomto případě byl katalyzátor nanášen metodou reaktivního magnetronového naprašování. Dosažené výsledky poskytují detailnější informace a umožňují porovnání různých typů katalyzátorů a tak přispět k dalšímu směřování výzkumu v této oblasti.

Tento výzkum byl financován v rámci projektu „Palivové články s nízkým obsahem platiny“ registrovaným pod číslem CZ.02.2.01/0.0/0.0/16_025/0007414.

7P08

PŘÍPRAVA A VLASTNOSTI YSZ KERAMICKÝCH ELEKTROLYTŮ PRO VYSOKOTEPLTNÍ REVERZIBILNÍ ČLÁNKY S PEVNÝMI OXIDY

Michal Carda¹, Nela Adamová¹, Daniel Budáč¹,
Martin Páidar¹, Karel Bouzek¹

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

Vysokoteplotní články s keramickými oxidy (SOC) představují perspektivní systém pro uchování energie ve formě vodíku. Díky vysoké provozní teplotě (600 – 900 °C) mají tyto články vysokou účinnost a možnost pracovat v režimu palivového článku nebo elektrolyzy vody v jednom zařízení bez potřeby Pt kovů. Nevýhodou však jsou výrazně urychlené degradační procesy a zároveň vyšší nároky na chemickou stabilitu a termomechanickou kompatibilitu použitých materiálů. Klíčovou součástí SOC je elektrolyt, který musí být plynotěsný a musí vykazovat dobrou iontovou vodivost, s tloušťkou pod 1 mm a plochou přes 1 dm². Mezi nejčastěji používané materiály pro přípravu elektrolytu patří ZrO₂-Y₂O₃ (YSZ), zejména vzhledem k jeho relativně dobré iontové vodivosti a termomechanické kompatibilitě s většinou elektrodových materiálů. Koncentrace dopantu (Y₂O₃) ovlivňuje nejen iontovou vodivost, ale i mechanickou a tepelnou stabilitu elektrolytu. Cílem této práce je optimalizovat přípravu YSZ elektrolytu s různým množstvím dopantu a charakterizovat jeho iontovou vodivost. Z komerčně dostupných prekurzorů byl připraven YSZ prášek, který byl charakterizován z hlediska morfologie i složení. Optimalizací sintračního procesu byly získány slinuté elektrolyty, u kterých byly charakterizovány jejich elektrochemické vlastnosti. Dosažené výsledky ukázaly, že použitá metoda poskytuje elektrolyty o požadovaném složení se srovnatelnými vlastnostmi, které vykazují elektrolyty připravené z komerčně dostupných YSZ prášků.

Tato práce byla uskutečněna za finanční podpory Grantové agentury České republiky (GA ČR) projekt: GC19-14244J a z projektu Specifického vysokoškolského výzkumu – projekt č. A2_FCHT_2021_083

7P09

SIMULÁCIA PRIENIKU
DEACIDIFIKAČNÝCH KOMPONENTOV
DO PAPIERA

Vladimír Danielik, Milan Králik, Marta Ambrová,
Jana Jurišová, Katarína Vizárová

Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU v
Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava,
vladimir.danielik@stuba.sk

Ochrana kníh a archívnych dokumentov je aktuálny problém, ktorým sa zaoberajú reštaurátorské a konzervátorské pracoviská knižníc a archívov, ako i výskumné tímy univerzitných a iných vedeckovýskumných pracovísk vo svete. Doteraz bolo vyvinutých, aj v praxi vyskúšaných viacero deacidifikačných metód, avšak iba niektoré z nich majú perspektívu v budúcnosti vzhľadom na ekonomickosť a požadovanú efektívnosť. Prienik komponentov deacidifikačného systému do štruktúry papiera je komplikovaný v dôsledku zložitej a rônorodnej štruktúry papierových objektov (základom papiera sú celulózoové vlákna, ktoré obsahujú rôzne orientované makrofibrily, čo sú zväzky mikrofibrilových vlákien a tie pozostávajú zo zväzkov polymérnych celulózoových reťazcov). Vzhľadom na komplexnosť tohto problému ešte nebol študovaný prienik zlúčenín do takejto vrstvy papiera z kvantitatívneho hľadiska, čo by umožnilo vytvoriť teoretický model a následnú simuláciu tohto procesu.

V tejto práci predstavíme základný teoretický model takejto simulácie, definujú sa parametre, ktoré sú dôležité pre správny návrh teoretického modelu.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APVV-18-0155 (Syntéza, kompatibilizácia a transport komponentov multifunkčných systémov vhodných na stabilizáciu celulózoových materiálov (MUFUSCEM)).

7P10

STEAM EXPLOSION AND STEAM
EXTRUSION PRETREATMENT AS
AUXILIARY METHODS FOR
CONCENTRATION ENHANCEMENT OF
MONOSACCHARIDES FROM
HYDROLYSATES BASED ON SELECTED
LIGNOCELLULOSIC MATERIALS

Andrej Pažitný^{1,2}, Michal Halaj,¹ Albert Russ¹, Štefan Boháček¹, Vladimír Ihnát³, Ida Skotnicová², Štefan Štutý²

¹Pulp and Paper Research Institute, JSC, Dúbravská cesta 14, 84104 Bratislava 4, Slovak Republic, ²Slovak University of Technology, Faculty of Chemical and Food Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovak Republic, ³Slovak Forest Products Research Institute, Dúbravská cesta 14, 84104 Bratislava 4, Slovak Republic, pazitny@vupc.sk

Steam explosion and steam extrusion are promising pretreatment methods that are potentially useful in biofuel chemistry. These physico-chemical methods modify lignocellulosic materials with recalcitrant nature [1]. Thereby the accessibility of cellulose to the enzyme molecules and the subsequent enzymatic attack are improved [2, 3]. Pilot experiments of enzymatic hydrolysis of beech wood particles and some other lignocellulosic substrates pretreated by steam explosion (STEX) or alkaline extrusion (ALEXT) were performed. The most significant differences in case of ALEXT were when comparing the concentration of monosaccharides in the hydrolysates of samples without pretreatment and samples pretreated by ALEXT at 200 °C. In this case, the highest concentration of total monosaccharides was reached at the level of 57 g.L⁻¹ (enzymatic hydrolysis for 24 hours). The average concentration of glucose and xylose here reached the level of 36 g.L⁻¹ or 18 g.L⁻¹, in contrast to the original beech substrate – 13 g.L⁻¹ or 4 g.L⁻¹, respectively. Inhibitors were not detected [3].

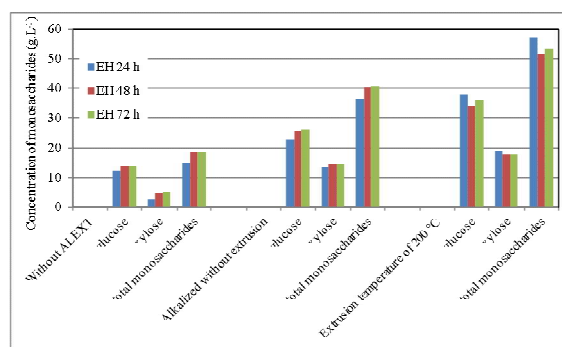


Fig. 1 The time dependence of the concentration of monosaccharides in the hydrolysates of beech particles

pretreated by alkaline extrusion at a temperature of 200 °C and the comparison of the composition of the hydrolysates with the composition of hydrolysates of non-extruded beech particles.

Acknowledgements

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the Contract no. APVV-18-0240.

- [1] Stankovská, M., Fišerová, M., Gigac, J., Pažitný, A.: *Cell. Chem. Technol.* 52, 815 (2018).
- [2] Pažitný, A., Boháček, Š., Halaj, M., Ihnát, V., Šutý, Š.: *Method for the hydrolysate production with a higher concentration of monosaccharides from lignocellulosic materials.* Pulp and Paper Research Institute, JSC, Bratislava. PA 50031-2021 (IPO SR, 14.05.2021).
- [3] Kucharska, K., Rybarczyk, P., Hołowacz, I., Łukajtis, R., Glinka, M., Kamiński, M.: *Molecules* 23, 2937 (2018).

7P11

EXPERIMENTÁLNÍ STUDIUM ROVNOMĚRNOSTI DISTRIBUCE TOKU ELEKTRICKÉHO PROUDU V PILOTNÍM ELEKTRODIALYZÉRU

Roman Kodým¹, Michal Němeček¹, Dalimil Šnita², Karel Bouzek¹

¹Ústav anorganické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 16628 Praha, kodymr@vscht.cz

²Ústav chemického inženýrství technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 16628 Praha, kodymr@vscht.cz

Elektrodialýza (ED) představuje vyspělou a dobře zavedenou technologii odsolování a membránové separace s typickou konfigurací deska-rám (filter-press design). Za účelem uspokojení aplikačních požadavků a snížení investičních i provozních nákladů je v současnosti vývoj této technologie směřován především na zvyšování rozměrů tohoto zařízení. Stejně je tomu ale i v případě dalších podobných elektrochemických membránových procesů (elektrolyzéry, palivové články, elektromembránové reaktory atd.). To však sebou přináší komplikace s dosažením rovnoměrné distribuce hmoty a náboje v zařízení a mechanické stability svazku.

Předkládaná práce je zaměřena na experimentální stanovení distribuce intenzity toku elektrického proudu v pilotní ED jednotce skládající se z 200 vertikálně orientovaných párů membrán s pracovní plochou $0,635 \times 0,315 \text{ m}^2$ na membránu. Rovinné deskové elektrody jsou horizontálně segmentovány do 6-ti identických a elektricky izolovaných segmentů, což umožňuje

určení distribuce proudu podél hlavního směru toku roztoků. Hlavními příčinami nerovnoměrné distribuce elektrického proudu jsou parazitní (zkratové) proudy a samotný proces odsolení. Jsou identifikovány podmínky potenciálně rizikové pro provoz ED. Rovněž jsou určeny kvalitativní vztahy mezi nerovnoměrností distribuce hustoty proudu a výkonem procesu. Získané výsledky lze zobecnit na jiné podobné elektromembránové a elektrochemické systémy s podobným uspořádáním deska-rám.

7P12

ŽELEZAN – OCHRANCA BEZPEČNÉHO ŽIVOTNÉHO PROSTREDIA

Ján Híveš¹, Kamil Kerekeš¹, Emília Mališová¹, Tomáš Mackulak², Miroslav Gál¹

¹Odd. anorg. technol. FCHPT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, jan.hives@stuba.sk

²Odd. envir. inžinierstva FCHPT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, tomas.mackulak@stuba.sk

Pokročilé oxidačné procesy (AOP's) predstavujú v súčasnosti významné metódy odstraňovania polutantov zo životného prostredia. Jednou z možných metód je použitie silných chemických oxidovadiel, ktoré dokážu degradovať aj veľké organické molekuly polutantov prípadne mikroorganizmov - baktérií a vírusov v odpadových vodách. V reálnych systémoch dočisťovania odpadových vôd je možné očakávať technológie, ktoré sa budú skladať z viacerých techník, napr. biologické metódy a AOP's metódy, tzv. hybridné metódy, ktoré dokážu efektívne riešiť problematiku znečistenia.

V našom príspevku predstavíme najnovšie výsledky z elektrochemickej prípravy železanu z hľadiska spôsobu prípravy, prúdovej účinnosti, výťažku procesu a čistoty finálneho produktu. V ďalších častiach uvedieme možnosti aplikácie železanov pri dočisťovaní odpadových vôd modelového typu ako aj reálnych vôd z prírodných či priemyselných procesov.

Železan draselný (K_2FeO_4) pripravujeme elektrochemickou oxidáciou železanej anódy v alkalickom prostredí. Sme schopní pripraviť koncentrované roztoky železanu (20 hm%), ktoré po spracovaní dávajú finálny tuhý produkt s čistotou okolo 70 %. Takto pripravený železan je následne používaný v aplikáciách pri dočisťovacích procesoch.

Ako prvý bude spomenutý proces dočisťovania odpadových vôd z Petřalskej čistiarne odpadových vôd. Z 27 mikropolutantov sa pozornejšie sledovalo 13 zlúčenín, v mnohých

prípadoch sa dosiahli vynikajúce výsledky ich degradácie [1].

V druhom procese dočist'ovania predstavíme výsledky degradácie znečistenia sinicami v prírodnom jazere Gazárka – Šaštín Stráže. V spolupráci s ÚVZ SR sme komplexne analyzovali možnosti degradácie siníc z jazera pomocou železanov [2] s výborným výsledkom.

V treťom príklade sme použili železany na dočist'ovanie odpadových vôd z nemocnice Kramáre, kde sme dokázali efektívne odstraňovať SARS-CoV-2 RNA fragmenty prítomné v týchto odpadových vodách. Použité oxidačné procesy dokumentovali vysokú účinnosť odstraňovania znečistenia v poradí (od najúčinniejšieho) železany > Fenton > FLR. Bežné dezinfekčné procesy odporúčané WHO neboli schopné kompletne zdegradovať zvyškovú RNA vírusu prítomnú v odpadových vodách.

Pod'akovanie

Táto práca vznikla vďaka podpore Ministerstva Školstva, Vedy, Výskumu a Športu SR v rámci projektu VEGA 1/0343/19, a Agentúrou pre podporu výskumu a vývoja projekt APVV-17-0183.

Literatúra

- [1] Mackuľak, T., Grabic, R., Špalková, V., Belišová, N., Škulcová, A., Slavík, O., Horký, P., Gál, M., Filip, J., Híveš, J., Vojs, M., Staňová, A.V., Medved'ová, A., Marton, M., Birošová, L.: *Envir. Scie. and Poll. Research* 26, 31812 (2019).
- [2] Kubinakova, E.; Hives, J., Gal, M., Faskova, A.: *Envir. Scie. and Poll. Research* 24, 21894 (2017).

CENA MARTY SALIŠOVEJ

CMS01 OXIDOREDUCTASE-BASED MINI-REACTOR COUPLED WITH SILVER SOLID AMALGAM ELECTRODE AS THE PERSPECTIVE BIOSENSING PLATFORM IN FLOW ANALYSIS

Sofia Tvorynska^{1,2}, Jiří Barek², Bohdan Josypčuk¹

¹J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry of the Czech Academy of Sciences, Dolejškova 3, 182 23 Prague, Czech Republic, sofia.tvorynska@jh-inst.cas.cz

²Charles University, Faculty of Science, Department of Analytical Chemistry, UNESCO Laboratory of Environmental Electrochemistry, Hlavova 2030/8, 128 43 Prague, Czech Republic

The contribution is focused on the development of a promising flow biosensing platform based on two main features, which enables to overcome the limitations inherent in the amperometric enzyme-based biosensors (where the used enzyme belongs to the oxidoreductase family) [1-3].

The first feature is the immobilization of enzyme not at the surface of the working electrode but on some powdered support forming filling for co-called enzymatic mini-reactor that is spatially separated from the detection part. This approach enables the attachment of the much larger amount of enzyme and solves the limitations of the most biosensors given by their relatively low stability and short lifetime.

The second feature deals with the principle of detection for the amperometric biosensors. To avoid the interference effects that are common in detection of enzymatically produced hydrogen peroxide, monitoring of oxygen consumption at highly negative potentials has been proposed (the decrease of oxygen caused by enzymatic reaction is proportional to the analyte concentration). For this purpose, the flow detectors based on silver solid amalgam have been proposed, developed and constructed in our laboratory and used to determine unconsumed oxygen via its sensitive four-electron reduction.

Financial support provided by the Grant Agency of Charles University (Project 1356120) and by the Grant Agency of the Czech Republic (Project 20-01589S) is gratefully acknowledged. This research

was performed within the framework of Specific Charles University Research (SVV 260560).

- [1] Tvorynska S., Barek J., Josypčuk B.: *Electroanalysis*. 31, 1901 (2019).
- [2] Tvorynska S., Barek J., Josypčuk B.: *J. Electroanal. Chem.* 860, 113883 (2020).
- [3] Tvorynska S., Barek J., Josypčuk B.: *Sens. Actuators B.* 344, 130252 (2021).

CMS02 STRIEBORNÉ NANOČASTICE AKO PERSPEKTÍVNE NOSIČE LIEČIV

Veronika Svitková¹, Katarína Nemčeková¹, Jozef Sochr¹, Ján Labuda¹

¹Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav analytickej chémie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, veronika.svitkova@stuba.sk

SMART systémy dodávania liečiv založené na nanomateriáloch ako nanonosičoch sú unikátnou možnosťou na dosiahnutie cieľa vytvoriť selektívnejšiu, účinnejšiu a špecifickú liečbu rakoviny za súčasnej eliminácie nežiadúcich účinkov systémovej liečby. Nanomateriály, ktoré sú schopné citlivo reagovať na zmeny parametrov prostredia (napríklad zmenu pH), sa považujú za obzvlášť atraktívne nosiče pre ciele doručovanie a uvoľňovanie liečiv. V biomedicínskych aplikáciách sa práve strieborné nanočastice stali perspektívne pri vývoji takýchto systémov pre ich antibakteriálnu, antimikrobiálnu, antimykotickú, antivírusovú, protizápalovú a protirakovinovú aktivitu [1, 2]. Zachytávanie chemoterapeutík v biokompatibilných a biologicky odbúrateľných nanonosičoch ponúka perspektívu cielenej expozície nádorového tkaniva a redukciu systémových nežiaducich účinkov, čo má význam najmä pri látkach s kumulatívnou toxicitou (ako je bežne používaný doxorubicín) [3].

Sférické strieborné nanočastice a strieborné nanoprizmy sa syntetizovali a charakterizovali z hľadiska ich homogenity a distribúcie veľkosti a tvaru pomocou rastrovacej elektrónovej mikroskopie (SEM). Následne sa pomocou UV-Vis spektrometrie a elektrochemických senzorov overila ich stabilita a potenciálna toxicita s dôrazom na tvorbu nežiadúcich reaktívnych foriem kyslíka.

Táto práca má napomôcť pri vývoji citlivých nanonosičov pre ciele doručenie a riadené uvoľňovanie liečiv k rakovinovým bunkám.

Táto práca vznikla s podporou projektu VEGA 1/0159/20 a v spolupráci s výskumnou skupinou prof. Marie Hepel, SUNY Potsdam, USA.

- [1] Karimi, M., Eslami, M., Sahandi-Zangabad, P., Mirab, F., Farajisafiloo, N., Shafaei, Z., Ghosh, D., Bozorgomid, M., Dashkhaneh, F., Hamblin, M.R.: *WIREs Nanomed. Nanobiotechnol.* 8, 696 (2016).
- [2] Zhang X., Liu Z., Shen, W., Gurunathan, S.: *Int. J. Mol. Sci.* 17, 1534 (2016).
- [3] Pushpalatha R., Selvamuthukumar S., Kilimozhi D.: *J. Drug. Deliv.. Sci. Technol.* 39, 362 (2017).

CMS03

APTAMER-MODIFIED PENCIL GRAPHITE ELECTRODES FOR THE IMPEDIMETRIC DETERMINATION OF OCHRATOXIN A

Katarína Nemčeková^{1,2}, Gültekin Gökçe^{2,3}, Sondes Ben Aissa^{2,4}, Gaëlle Catanante², Nouredine Raouafi⁴, Jean-Louis Marty²

¹Slovak University of Technology in Bratislava, Faculty of Chemical and Food Technology, Institute of Analytical Chemistry, Radlinského 9, 812 37, Bratislava, katarina.nemcekova@stuba.sk

²Université de Perpignan Via Domitia, BAE-LBBM: Biocapteurs-Analyses-Environment, 66860, Perpignan CEDEX, France

³Cumhuriyet University, Pharmacy Faculty, 58140, Sivas, Turkey

⁴Université de Tunis El Manar, Faculté des Sciences de Tunis, Laboratoire de Chimie Analytique et Electrochimie, Sensors and Biosensors Group, Campus Universitaire de Tunis El Manar, 2092, Tunis, Tunisia

Ochratoxin A (OTA), a member of mycotoxins family produced by various species of *Aspergillus* and *Penicillium*, is considered as a toxic secondary metabolite and can contaminate cereals and wines [1]. Here, we present for the first time a label-free impedimetric aptasensor for the rapid detection and quantification of OTA in beer samples using pencil graphite electrode (PGE) [2]. The developed aptasensor was constructed based on *in situ* diazonium-coupling reaction mechanism and further immobilization of the OTA aptamer [3]. The aptasensor exhibited a promising limit of detection of 0.1 ng.mL⁻¹ with a high level of selectivity and reproducibility. The increase in electron transfer resistance was linearly proportional to the OTA concentration in the range of 0.1 - 2.0 ng.mL⁻¹ with an acceptable recovery percentage (92-94 %, RSD = 3.94 %) obtained for beer samples. This work offers the best cost/efficiency ratio without the need of nanomaterials integration or aptamers labeling.

The authors greatly acknowledge the financial support from "The Scientific and Technological Research Council of Turkey (TUBITAK, 2219-2017/2). SBA is grateful for financial support from European ERASMUS+ program for the mobility scholarship "EMIC", as well as for the mobility grant "Bourse d'alternance" provided by the University of Tunis El Manar (Tunisia).

- [1] Malir F., Ostry V., Pfohl-Leszkowicz A., Malir J., Toman J.: *Applied Surface Science.* 225, 4 (2008).
- [2] Gökçe G., Ben Aissa S., Nemčeková K., Catanante G., Raouafi N., Marty J. L.: *Food Control.* 115 (2020).
- [3] Bélanger D., Pinson J.: *Chem. Soc. Rev.* 40, 7 (2011).

CMS04

EFFECT OF THERMORESPONSIVE POLY(2-OXAZOLINE)S ON FORMATION OF DEXAMETHASONE MICROPARTICLES

Monika Majerčíková¹, Anna Zahoranová², Zuzana Kroneková¹, Juraj Kronek¹

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

² Institute of Applied Synthetic Chemistry, Vienna University of Technology, Getreidemarkt 9/163MC, A-1060 Vienna, Austria

Poly(2-oxazolines) also known as pseudopeptides are considered as biocompatible polymers suitable for various biomedical applications [1]. From this broad group of polymers, several poly(2-oxazoline)s were reported to respond to external or internal stimuli such as temperature, pH, ultrasound [2]. This behavior can be further employed for targeted therapeutic treatment and the release of a drug at a specific site. Block and gradient copolymers based on poly(2-oxazoline)s are able to encapsulate large amounts of hydrophobic drugs forming nanoparticles. Dexamethasone (Dexa) is a hydrophobic anti-inflammatory drug that also shows a reduction in patient deaths from covid-19 who are on mechanical ventilation.

Here we investigated the effect of the anti-inflammatory drug Dexamethasone on the formation of microparticles with a diblock copolymer of thermoresponsive 2-n-propyl-2-oxazoline (nPrOx) and hydrophilic 2-methyl-2-oxazoline (MeOx). From the prepared small library of diblock copolymers with different composition and polymer chain length, we used nPrOx₂₀-b-MeOx₁₈₀ for the deeper investigation

of formed microparticles. Microparticles were formed after drug encapsulation using the thin film method. The drug concentrations used were 0.1-2 mg mL⁻¹ and the copolymer 10 mg mL⁻¹. After forming a thin film, the samples were dissolved in distilled water or PBS. In Figure 1, the microparticles are composed of 10 mg of mL⁻¹ polymer and 1 mg of mL⁻¹ Dexa, which were formed at 40 °C temperature and observed with an optical microscope. The size and number of particles depended on the concentration of Dexa and the temperature. The most regular microparticles of the diameter around 30 µm were obtained at the concentration of 1 mg·mL⁻¹ Dexa and 10 mg·mL⁻¹ of nPrOx₂₀-b-MeOx₁₈₀. Formed microparticles were characterized using several methods, such as SEM, UV/VIS spectrophotometry, DLS, WAXS, CRM, and optical microscopy with polarized light. These investigations demonstrated crystalline character of Dexa in the formed microparticles. [3]



Fig. 1 Microparticles formed from 10 mg·mL⁻¹ of P1 and 1 mg·mL⁻¹ of Dexa in distilled water examined by optical microscopy with visible light at temperature 40°C.

Authors are thankful to the Slovak Grant Agency VEGA for financial support in the project Nr. 2/0172/21 and Slovak Research and Development Agency (SRDA) for financial support in the projects Nr. APVV-19-0487 and APVV-20-0202. This study was performed during the implementation of the project Building-up Centre for advanced materials application of the Slovak Academy of Sciences, ITMS project code 313021T081 supported by Research & Innovation Operational Programme funded by the ERDF.

- [1] Kronek, J.; Kronekova, Z.; Luston, J.; Paulovicova, E.; Paulovicova, L.; Mendrek, B.: *J. Mater. Sci. Mater. Med.* 22, 1725–1734 (2011).
 [2] Salgarella, A. R.; Zahoranová, A.; Šrámková, P.; Majerčíková, M.; Pavlova, E; Luxenhofer, R.; Kronek, J; Lacík, I.; Ricotti, L.: *Scientific Reports*, 8, 9893 (2018).
 [3] Majerčíková M.; Nádaždy, P.; Chorvát, D.; Satrapinsky, L.; Valentová, H.; Kroneková, Z.;

Šiffalovič, P.; Kronek, J.; Zahoranová, A.: *Polymers*. 13, 1357 (2021).

CMS05 MONOKRYŠTALICKÉ DIAMANTOVÉ ELEKTRODY S RÔZNOU ÚROVŇOU DOPOVANIA BÓROM

Simona Baluchová^{1,2}, Karolina Schwarzová-Pecková¹, Luděk Míka³, Jan Fischer¹, Ladislav Fekete², Ladislav Klimša², Jaromír Kopeček², Vincent Mortet², Andrew Taylor²

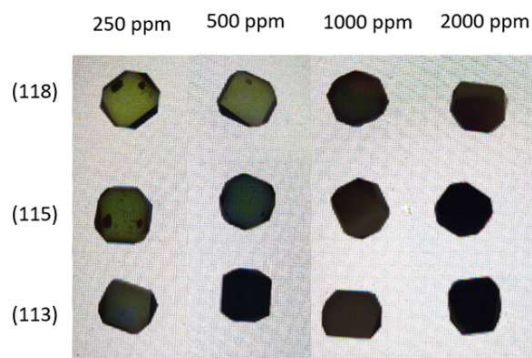
¹UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Albertov 6, 128 00 Praha 2, Česká republika, simona.baluchova@natur.cuni.cz

²FZÚ - Fyzikální ústav Akademie věd České republiky v.v.i., Na Slovance 2, 182 21 Praha 8, Česká republika

³Katedra učitelství a didaktiky chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Albertov 6, 128 00 Praha 2, Česká republika

Kontinuálny výskum vlastností bórom dopovaných diamantových (BDD) elektród prispel k lepšiemu pochopeniu faktorov, ktoré ovplyvňujú ich elektrochemické správanie [1]. V literatúre však existuje len niekoľko štúdií venujúcich sa vplyvu rôznej orientácie kryštálov, čo zrejme súvisí s obmedzenou dostupnosťou, veľkosťou a cenou monokryštalických BDD elektród, v porovnaní s bežne používanými polykryštalickými BDD filmami.

V rámci tejto práce bolo preto pripravených a študovaných 12 monokryštalických BDD filmov (znázornených na Obr. 1), využitím chemickej depozície pár za aktivácie mikrovlnným žiarením, ktoré sa líšili v (i) kryštálovej orientácii, konkrétne boli využité roviny (113), (115) a (118), a (ii) úrovni dopovania bórom (pomery B/C v plynnej fáze počas depozície (ppm): 250, 500, 1000 a 2000).



Obr. 1 Pripravené a študované monokryštalické BDD filmy deponované na diamantových monokryštáloch.

Morfologické charakteristiky pripravených monokryštalických BDD elektród boli preskúvané pomocou skenovacej elektrónovej mikroskopie a mikroskopie atomárnych síl. Keďže kryštalografická orientácia ovplyvňuje inkorporáciu bóru z plazmy [2], bola využitá Ramanova spektroskopie k štúdiu zloženia diamantovej vrstvy, predovšetkým k určeniu obsahu bóru [3]. Následne boli všetky elektródy elektrochemicky charakterizované pomocou cyklickej voltametrie s využitím piatich redoxných markerov, menovite $[\text{Ru}(\text{NH}_3)_6]^{3+/2+}$, $[\text{IrCl}_6]^{2-/3-}$, $\text{FcMeOH}^{+/0}$, $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-/4-}$, dopamín / dopamínchinón, ktoré sa líšia v charaktere prenosu elektrónu. Taktiež boli namerané elektrochemické impedančné spektrá k určeniu hodnôt kapacít elektrickej dvojvrstvy.

Táto práca bola finančne podporená Špecifickým vysokoškolským výskumom (SVV 260560), Grantovou agentúrou Univerzity Karlovej (projekt č. 390119) a Grantovou agentúrou Českej republiky (projekt č. 20-03187S).

- [1] Baluchová S., Daňhel A., Dejmková H., Ostatná V., Fojta M., Schwarzová-Pecková K.: Anal. Chim. Acta 1077, 30 (2019).
- [2] Pleskov Y. V., Evstefeeva Y. E., Krotova M. D., Varnin V. P., Teremetskaya I. G.: J. Electroanal. Chem. 595, 168 (2006).
- [3] Mortet V., Gregora I., Taylor A., Lamber N., Ashcheulov P., Gedeonova Z., Hubik P.: Carbon 168, 319 (2020).

CMS06 ELECTROCHEMICAL DETERMINATION OF LIPASE ACTIVITY AND CONCENTRATION IN PHARMACEUTICAL PREPARATIONS

Olha Sarakhman¹, Nadine Wenninger², Anita Rogala², Kurt Kalcher³, Eubomír Švorc¹, Astrid Ortner²

¹Slovak University of Technology in Bratislava, Faculty of Chemical and Food Technology, Institute of Analytical Chemistry, Radlinského 9, 812 37, Bratislava, Slovakia, olha.sarakhman@stuba.sk

²University of Graz, Institute of Pharmaceutical Sciences, Department of Pharmaceutical Chemistry, Schubertstraße 1, 8010, Graz, Austria

³University of Graz, Institute of Chemistry, Department of Analytical Chemistry, Universitätsplatz 1, 8010, Graz, Austria

Over the years, the demand for enzymes has grown worldwide. The global enzyme market revenue reached \$8.18 billion in 2015 and is expected to reach \$17.50 billion in 2024 [1]. In this context, lipases (triacylglycerol acylhydrolases, EC 3.1.1.3) should be

highlighted. *In vivo*, these enzymes catalyze triglycerides hydrolysis into free fatty acids and glycerol. A key problem encountered is that the lipase enzyme reaction takes place at the interface of the substrate oil in contact with an aqueous solution of lipase and it's rather difficult to keep the substrate oil highly dispersed in the enzyme reaction mixture during long incubation period [2]. Keeping this knowledge in mind, the main goal of our work was to develop a simple, fast and reliable amperometric lipase activity assay. The designed assay is based on carbon paste electrodes modified with cobalt (II) phthalocyanine-multiwalled carbon-nanotubes (MWCNTs), using flow injection analysis (FIA) as detection method. Various parameters which can affect either enzymatic reaction or FIA were evaluated. Apart from this, estimation of the sensitivity and selectivity was also conducted. Afterwards, the proposed method was successfully applied to the determination of lipase activity in pharmaceuticals.

This research was conducted in the framework of Action Slovak Republic-Austria. Nevertheless, it was supported by the Grant Agency of the Slovak Republic (VEGA No. 1/0159/20) and Operational Program Integrated Infrastructure for the project: "Strategic research in the field of SMART monitoring, treatment and preventive protection against coronavirus (SARS-CoV-2)", Project no. 313011ASS8, co-financed by the European Regional Development Fund.

- [1] Pellis A., Cantone S., Ebert C., Gardossi L.: *New Biotechnology* 40, 154 (2018).
- [2] The United States Pharmacopeia 23. United States Pharmacopeial Convention, Incorporated: Rockville (1995).

CMS07 ROZLOŽITEĽNÉ ORTOPEDICKÉ IMPLANTÁTY NA BÁZE ZINKU MODIFIKOVANÉ POLYMÉRNYM POVLAKOM

Radka Gorejová¹, Renáta Oriňaková¹, Ondrej Petruš², Tibor Sopčák², Viktória Čákyová¹, Andrej Oriňak¹

¹Katedra fyzikálnej chémie, Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta Univerzity Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11, 040 01 Košice, Slovenská republika, radka.gorejova@student.upjs.sk
²Ústav materiálového výskumu SAV, Watsonova 47, 040 01 Košice, Slovenská republika

Kovové biomateriály sú využívané v regeneratívnej medicíne tvrdých tkanív už dlhé roky. Medzi tradične používané patria tie na báze inertných kovov, ako sú napríklad titán či nehrdzavejúca oceľ [1]. Ich využitie však

sprevádza niekoľko nedostatkov, medzi ktoré patrí napríklad vyvolanie „*stress shielding*“ efektu či potreba sekundárneho zákroku na ich odstránenie. Alternatívu k týmto materiálom predstavujú biodegradovateľné implantáty, ktoré sa samovoľne vstrebajú *in vivo*. V súčasnosti sa pripravujú na báze horčíka, železa, a zinku [2]. Pre zlepšenie výsledných vlastností je možné upravovať ich povrch povlakovaním polymérnymi vrstvami. Ako sa ukázalo, ich použitím je možné dosiahnuť vhodnú mieru korózie pripravovaného implantátu a zlepšiť aj jeho biologické vlastnosti [3].

Boli pripravené biodegradovateľné materiály na báze zinku (Zn), ktoré boli následne modifikované polyetylén glykolom (PEG). Nanášanie polyméru prebiehalo z roztoku (10 hm. %) PEG metódou dip-coating. Nanesené vrstvy boli študované metódou röntgenovej difrakčnej analýzy (XRD), metódou Ramanovej spektroskopie a mikroskopickými metódami. Degradáčny správanie bolo študované elektrochemicky v simulovaných telesných tekutinách pri fyziologických podmienkach. Modifikácia kovových spekaných materiálov polymérnym PEG povlakom spôsobila zrýchlenie ich degradácie v porovnaní s nepovlakovanými vzorkami. Modifikáciou rozložiteľných biomateriálov nanášaním polymérnych vrstiev je teda možné škálovať ich degradáčny vlastnosti a tak pripraviť materiál s presne definovanou rýchlosťou korózie danou jeho konkrétnou aplikáciou.

Táto práca bola podporená Agentúrou na podporu výskumu a vývoja SR (projekty APVV-16-0029 a APVV-20-0278), Vnútorným vedeckým grantovým systémom PF UPJŠ (projekt vsgs-pf-2021-1773), Výskumnou agentúrou Ministerstva školstva, vedy, výskumu a športu SR (projekt Rozvoj a podpora výskumno-vývojových aktivít Centra pre testovanie kvality a diagnostiku materiálov v oblastiach špecializácie RIS3 SK, Akronym CEDITEK II., IMTS20014+ kód: 313011W442) a vedeckou spolupracou medzi SAV a MAV (projekt Low-temperature electrohydrodynamic techniques used for preparation of bioceramic coatings).

- [1] J. O'Brien Fergal: *Materials Today*. 14 (3), 88-95 (2011).
- [2] Yeung K. W., Wong K.H: *Technol. Health Care*, 20, 345-362 (2012).
- [3] Oriňaková R., Gorejová R., Orságová Kráľová Z., Oriňak A.: *Coatings*. 10, 819 (2020).

CMS08

EFFECT OF FLAVONOIDS ON COPPER INDUCED OXIDATIVE STRESS

Miriama Šimunková¹, Zuzana Barbieriková¹, Klaudia Jomová², Michal Malček¹, Marián Valko¹

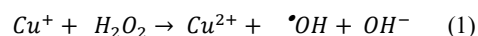
¹Oddelenie fyzikálnej chémie, ÚFCHCHF, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, STU, Radlinského 9, 81237,

Bratislava, miriama.simunkova@stuba.sk

²Katedra chémie, Fakulta prírodných vied, UKF, Trieda A. Hlinku 1, 949 74, Nitra

One of the well accepted explanations for Cu-induced cellular toxicity can be derived from the assumption that copper ions may participate in the formation of reactive oxygen species (ROS) via redox-cycling (e.g. decomposition of hydrogen peroxide in Fenton type reaction producing damaging hydroxyl radical) [1]. Many diseases (Alzheimer's disease or Parkinson's disease, Wilson's disease, Menke's disease, or hemochromatosis) are characterized by the disruption of metal homeostasis and the excess of free "uncomplexed metal" is the key trigger. Consequently, uncontrolled production of ROS is present. Therefore, chelation of free metal ions is one of the possible therapeutical approaches. Polyphenols (flavonoids) with antioxidant properties represent promising compounds among the agents capable of effective metal binding[2].

Based on these assumptions two flavonoids, kaempferol and luteolin, were chosen to study their protective effect in Cu-catalyzed Fenton system. These two compounds were selected based on the results from ABTS^{•+} assay, where their Cu(II)-flavonoid complexes exhibited better radical scavenging activity compared to parent flavonoid. At first, the formation of Cu(II)-flavonoid complexes was investigated by means of spectroscopic measurements. UV-Vis and EPR spectroscopy along with the theoretical calculations confirm binding of kaempferol and luteolin to Cu(II) ion. The protective role of kaempferol or luteolin in a Cu-catalyzed Fenton reaction system was studied by means of an EPR spin trapping technique, using DMPO as the spin trap, thus allowing evaluation of both the nature and concentrations of ROS formed via Fenton reactions (1) in reference system with free Cu or with addition of flavonoid.



The anticipated formation of hydroxyl radicals, $\cdot\text{OH}$, in Fenton system was confirmed using EPR spectroscopy, in the presence of DMPO spin trap, by the observation of dominant $\cdot\text{DMPO-OH}$ spin

adducts. However, the role of $O_2^{\bullet-}$ in the generation of ROS may be evidenced by the decrease of the \bullet DMPO–OH signal upon the addition of SOD to the reference system. The data obtained after the addition of flavonoid (kaempferol) show that Cu(II) chelated by kaempferol exhibits a suppressed catalytic activity in the Fenton reaction, and this results in a significantly decreased level of \bullet OH formation. However, the variations in the intensity of EPR signals of the spin adducts reflect a more complex involvement of the luteolin molecule in the reactions that occur when Cu(II) ions interact with H_2O_2 , it can be assumed that the presence of luteolin significantly diminishes the generation of ROS in this reaction, and of hydroxyl radicals, in particular (Fig.1).

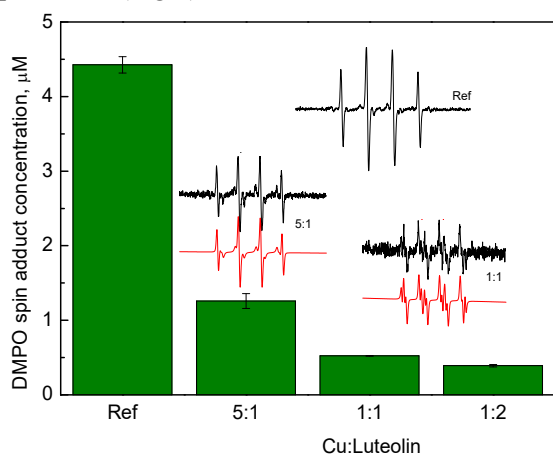


Fig 1. The effect of luteolin on the free radical's formation via (Cu)Fenton reaction.

The diminished catalytic activity of Cu(II) due to the coordinated flavonoid is in agreement with previous studies in which the catalytic activity of redox active metal ions has been linked to the availability of free metal binding sites. However, the significantly suppressed formation of ROS up to 80% with respect to reference system can be ascribed to limited catalytic activity of copper after chelation by flavonoid molecule, but on the other hand, radical-scavenging properties of free flavonoid possibly present in studied Fenton-system may also play a role.

I would like to thank for financial support Scientific Grant Agency (VEGA Project 1/0482/20) and Research and Development Support Agency (APVV-19-0087) and to STU Excellent Team of Young Researchers Grant-CUSPK.

- [1] Jomová K., Hudecová L.: *Molecules*. 24, 4335 (2020).
 [2] Jomová K., Lawson M., Droštinová L.: *FoodChemToxicol*. 110, 340-350 (2017).

CMS09

ULTRACITLIVÁ DETEKČIA AUTOPROTILÁTKOV VOČI ABERANTNÝM GLYKÁNOM PRÍTOMNÝCH PRI RAKOVINOVÝCH OCHORENIACH

Anna Blšáková, Filip Květoň, Lenka Lorencová, Ján Tkáč

¹Chemický ústav Slovenskej akadémie vied, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava

Prítomnosť aberantných glykánov (GalNAc α 1-O-Ser / Thr – Tn antigén, Neu5Ac α 2-6GalNAc α -O-Ser/Thr – sialyl-Tn antigén, Gal β 1-3GalNAc α 1-O-Ser/Thr – T antigen) je dokázaná u mnohých druhov rakoviny (prostata, žalúdok, hrubé črevo, pľúca, pažerák...), na ktoré imunitný systém reaguje vytvorením protilátok cirkulujúcich v krvi.

Pomocou biosenzorov sme schopní merať hladinu protilátok vo vzorke. V práci sme sa zamerali na optimalizáciu podmienok prípravy glykánového biosenzora citlivého na anti-Tn protilátku 2C4 a lektín DBA. Hlavnou elektrochemickou metódou pri stanovení glykán-proteínových interakcií bola diferenčná pulzná voltampérometria (DPV). Vyvinutý biosenzor detegoval analyt s vysokou selektivitou a senzitivitou až na atómolárnu úroveň. Monitorovali sme elektrochemické správanie sa na rôzne upravených povrchov sieťotlačených grafénových elektród cyklickou voltampérometriou (CV). Študovali sme kinetiku glykán (Tn, sTn, T antigén) -proteínovej (protilátka, lektín) interakcie pomocou povrchovej plazmónovej rezonancie (SPR) a získali rôzne kinetické konštanty. Následne sme detegovali protilátky vytvorením bežnejšie využívaným testom - štandardnou a modifikovanou metódou ELISA, ktorá je klinicky využívaným testom.

Táto publikácia vznikla vďaka podpore v rámci Operačného programu Integrovaná infraštruktúra pre projekt: CEMBAM - Centrum medicínskeho bioaditívneho výskumu a výroby, ITMS: 313011V358, spolufinancovaný zo zdrojov Európskeho fondu regionálneho rozvoja. Autori rovnako ďakujú za finančnú podporu z projektu APVV 17-0300.

**CMS10
DESIGN OF A VOLTAMMETRIC SENSOR
FOR NITRIC OXIDE BASED ON
MODIFIED CARBON PASTE
ELECTRODES**

Nadine Wenninger¹, Christina Bernhart¹, Urska Bracic¹, Alexander Kollau², Kingkan Pungjunun³, Kurt Kalcher⁴, Astrid Ortner¹

¹ *Institute of Pharmaceutical Sciences, Department of Pharmaceutical Chemistry, University of Graz, Schubertstraße 1, 8010, Graz, Austria*

² *Institute of Pharmaceutical Sciences, Department of Pharmacology and Toxicology, University of Graz, Humboldtstraße 46/I, 8010, Graz, Austria*

³ *Electrochemistry and Optical Spectroscopy Center of Excellence (EOSCE), Department of Chemistry, Faculty of Science, Chulalongkorn University, 254 Phayathai Road, Pathumwan, Bangkok, 10330, Thailand*

⁴ *Institute of Chemistry, Department of Analytical Chemistry, University of Graz, Universitätsplatz 1, 8010, Graz, Austria*

Nitric oxide (NO) is a ubiquitous signal molecule in the human organism. It is not only involved in physiological, but also in pathophysiological processes [1–3]. Among other effects, NO causes vasodilation of smooth muscle cells [1] and has anti-inflammatory and immunosuppressive properties by inhibiting the proliferation of B and T cells [3]. The change of the physiological NO

concentration can result in different diseases [2]. Due to its instability in vivo and in vitro, its rapid and direct detection is necessary to obtain meaningful results. The main purpose of this work consisted on the design of a sensor for the rapid electrochemical detection of nitric oxide using a carbon paste electrode, modified by drop casting method. To increase the sensitivity and selectivity of the sensor, different nanomaterials were tested during the development process. The final proposed chemosensor, consisting of nanoribbons, gold nanoparticles and Nafion, showed good reproducibility and repeatability, as well as a very low detection limit. The sensor has been successfully used to measure the NO release from NO donors. Based on the results obtained, the new sensor offers a simple and fast method for a direct voltammetric determination of low nitric oxide concentrations in solutions.

- [1] Ignarro LJ., Buga G.M., Wood KS., Byrns RE., Chaudhuri G.: *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*. 84, 9265–9269 (1987)
- [2] Naseem KM.: *Molecular Aspects of Medicine*. 26, 33–65 (2005)
- [3] Bogdan C.: *Nature Immunology*. 2, 907–916 (2001)

POSTERY - SEKCIA 1
ANALYTICKÁ A FYZIKÁLNA CHÉMIA

1Po01**COMPARISON OF TWO DIFFERENT METHODS OF PROTEOME ISOLATION FROM OPIUM POPPY**

Kristýna Kundrátová¹, Martin Bartas¹, Petr Pečinka¹, Vladislav Čurn², Jiří Červen¹

¹*Department of Biology and Ecology, Faculty of Science, University of Ostrava, Ostrava, 710 00, Czech Republic; tynakundrat@post.cz (K.K.); martin.bartas@osu.cz (M.B.); petr.pecinka@osu.cz (P.P.); jiri.cerven@osu.cz (J.C.);*

²*Department of Genetics and Agricultural Biotechnology, Faculty of Agriculture, University of South Bohemia, Studentska 1668, 370 05 Ceske Budejovice, Czech Republic; curn@zf.jcu.cz*

The methods of quantitative proteomics are more and more used in molecular biology research to track whole proteome changes in biological samples. Here we compared two different methods of proteome isolation (SDT and Trizol) from our organism of interest, opium poppy (*Papaver somniferum*). SDT and Trizol isolates of opium poppy plants were subjected to filter-aided sample preparation as described elsewhere [1]. The resulting peptides were analyzed by liquid chromatography–tandem mass spectrometry (LC–MS/MS) performed using UltiMate 3000 RSLCnano system (Thermo Fisher Scientific) on-line coupled with Orbitrap Q Exactive HF-X spectrometer (Thermo Fisher Scientific). Surprisingly, we found many significant differences in proteome composition, both in absolute quantities of particular proteins and in relative changes of protein expression in the treatment group (drought response). Our results underline the need for standardized proteome isolation workflow to ensure a better reliability of obtained proteomic data between researchers.

This research was funded by Ministry of Agriculture of the Czech Republic, grant number QK1810391, by University of South Bohemia GAJU027/2019/Z, and by University of Ostrava, SGS01/PřF/2020. CIISB, Instruct-CZ Centre of Instruct-ERIC EU consortium, funded by MEYS CR infrastructure project LM2018127, is gratefully acknowledged for the financial support of the measurements at the CEITEC Proteomics Core Facility.

[1] Wisniewski et al.: *Nature Methods*.6, 359–362 (2009).

1Po2**GC-MSD ANALÝZA DERIVÁTOV 2-DEOXYSACHARIDOV**

Jaroslav Blaško¹, Róbert Kubinec¹, Ludmila Gabrišová², Oliver Macho², Rastislav Hrčka¹, Ľubomíra Duháčková¹, Janka Kubincová³, Marek Kunštek³, Jozef Višňovský⁴

¹*Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, jaroslav.blasko@uniba.sk*

²*Slovenská technická univerzita v Bratislave - Strojnícka fakulta, Vazovova 5, 81243 Bratislava*

³*Národné poľnohospodárske a potravinové centrum, Výskumný ústav potravinársky, Biocentrum Modra, Kostolná 7, 900 01 Modra*

⁴*SynthCluster, s.r.o., Moyzesova 15, 900 01 Modra*

Novo-vyvinutá metóda umožňuje separovať produkty elektrofilnej adície nenasýtených sacharidov fluóračnými činidlami, respektíve azidonitračnej reakcie azidu a 1,2-nenasýtenými sacharidmi, ktoré sú mimoriadne zaujímavé z pohľadu ich vlastností a uplatniteľnosti predovšetkým vo farmaceutickom priemysle.

Metóda, založená na plynovo-chromatografickej separácii s hmotnostno-spektrometrickou detekciou, je veľmi rýchla, do 8 minút umožňuje identifikovať a kvantifikovať prítomnosť východiskovej látky, ako aj vzniknuté deriváty v reakčnej zmesi. Deriváty sacharidov sa derivatizujú in situ pomocou dvojkrokovej silylácie, čo zabezpečuje takmer 100% účinnosť premeny jednotlivých zložiek na príslušné trimetylsilylové deriváty, bez vzniku rozkladných príp. iných vedľajších reakčných produktov. Na identifikáciu jednotlivých fluóro a azido derivátov ako zmesi možných epimérov sa využila kombinácia hmotnostnej spektrometrie spoločne s koreláciou retencia-štruktúra.

Tento príspevok vznikol s podporou Agentúry na podporu výskumu a vývoja projektami APVV-18-0282, APVV-20-0317 a za finančnej podpory projektov ITMS-313011V336 a ITMS2014+: 313021X329, spolufinancovaný zo zdrojov Európskeho fondu regionálneho rozvoja.

1Po03**VLIV SLOŽENÍ MOBILNÍ FÁZE NA
RETENCI A SEPARACI N-
BLOKOVANÝCH DIPEPTIDŮ
NA STACIONÁRNÍ FÁZI S „MIX-MODE“
CHARAKTEREM**

Hana Boudová¹, Zuzana Kadlecová¹, Květa Kalíková¹

¹ *Katedra fyzikální a makromolekulární chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Hlavova 2030/8, 128 00, Praha 2, Česká republika
hana.boudova@natur.cuni.cz*

Stacionární fáze (SF) s „mix-mode“ charakterem se významně uplatňují při separacích komplexních směsí sloučenin s odlišnými fyzikálně-chemickými vlastnostmi. Důvodem je schopnost „mix-mode“ stacionárních fází za vhodných podmínek poskytovat minimálně dva interakční/retenční mechanismy současně, a tím umožňovat separaci analytů například na základě jejich různé polaritě i náboje [1].

Mezi SF s „mix-mode“ charakterem je možné zařadit i reverzní fáze s tzv. charged-surface hybrid (CSH) částicemi. CSH částice vykazují nízký povrchový kladný náboj daný přítomností pyridylových skupin. Tyto fáze tedy kombinují reverzní fázi (např. C18) s aniontově výměnou skupinou (pyridyl). Přítomnost kladného náboje na povrchu CSH částic je nicméně limitována zvoleným pH mobilní fáze a poskytuje tak zvýšenou retenci záporně nabitých analytů pouze při pH < 6 [2].

Tato práce je zaměřena na testování vlivu složení mobilní fáze na retenci a separaci devíti *N*-benzoyl-dipeptidů na CSH C18 SF. V závislosti na pH mobilní fáze může tato stacionární fáze interagovat s *N*-blokovanými dipeptidy i prostřednictvím disociované karboxy- skupiny a poskytovat tak odlišnou selektivitu oproti klasickým reverzním fázím. Pro tyto účely byly vybrány čtyři vodné složky mobilní fáze o různém pH, konkrétně mravenčí kyselina, pH = 2,1; 10mM mravenčan amonný, pH = 3,0 a 10mM octan amonný, pH = 4,7 a 6,9.

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky (číslo grantu:20-19655S).

[1] Bell D.S.: *LCGC N. Am.*, 39, 56-60 (2021).

[2] Kadlecová Z., Kozlík P., Tesařová E., Gilar M., Kalíková K.: *J. Chromatogr. A*, 1648, 462182 (2021).

1Po04**ELEKTROCHEMICKÁ OXIDACE
DERIVÁTŮ FENOLU NA BOREM
DOPOVANÉ DIAMANTOVÉ ELEKTRODĚ
TERMINOVANÉ KYSLÍKEM**

Hana Dejmková, Šárka Sládková, Karolina Schwarzová

*Univerzita Karlova, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO Laboratoř elektrochemie životního prostředí, Albertov 6, 128 43 Praha 2,
dejmkova@natur.cuni.cz*

Stav povrchu borem dopované diamantové elektrody (BDDE) významnou měrou ovlivňuje elektrochemické reakce, které na tomto povrchu probíhají. Terminace kyslíkem je jednou ze základních variant, protože povrch BDDE je oxidován i vzdušným kyslíkem, přestože pro kontrolovanou terminaci se volí výhodnější vkládání anodických potenciálů. Detaily vlivu různých typů terminace na elektrochemické chování látek zatím nicméně zůstávají poměrně málo prozkoumanou problematikou. [1]

Cílem této práce bylo prozkoumat vliv substituce fenolu na elektrochemické chování jeho derivátů. DC voltamogramy sady vybraných substitučních derivátů fenolu byly změřeny v kyselém i zásaditém prostředí na BDDE elektrodě s různým stupněm dopace borem. Byla sledována závislost pozice a výšky píku na obou typech parametrů, tedy na stupni dopace a na přítomnosti substituentů, vyjádřené pomocí Hammetových konstant. Pozorovaná míra korelace byla značná v kyselém prostředí, zejména na méně dopovaných elektrodách.

Tato práce byla finančně podpořena Grantovou agenturou České republiky (projekt GAČR 20-03187S).

[1] Baluchová S., Daňhel A., Dejmková H., Ostatná V., Fojta M., Schwarzová-Pecková K.: *Anal. Chim. Acta* 1077, 30 (2019).

1Po05**VLIV SÉRIOVÉHO ZAPOJENÍ KOLON NA BÁZI MAKROCYKlickÝCH GLYKOPEPTIDŮ NA ENANTIOSEPARACI BIOLOGICKY AKTIVNÍCH LÁTEK V SUB/SUPERKRITICKÉ FLUIDNÍ CHROMATOGRAFII**

Denisa Folprechtová, Eva Tesařová, Květa Kalíková

Katedra fyzikální a makromolekulární chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Hlavova 2030/8, 128 00 Praha 2, denisa.folprechtova@natur.cuni.cz

Sériové zapojení kolon v sub/superkritické fluidní chromatografii (SFC) představuje možnost, jak ovlivnit separační účinnost a rozšířit selektivitu separačního systému [1]. Vhodná kombinace různých typů chirálních stacionárních fází může zlepšit rozlišení jednotlivých enantiomerů, avšak sériově zapojené (tandemové) kolony musí být vzájemně komplementární. Pokud tuto vlastnost nevykazují, může po zapojení takových kolon dojít k úplné ztrátě rozlišení enantiomerů [2].

V této práci byly použity kolony s povrchově porézními částicemi (2,7 μm) na bázi makrocyklických glykopeptidů, tj. TeicoShell a NicoShell. Byl studován vliv zapojení tandemových kolon na enantioseparaci strukturně odlišných biologicky aktivních látek, tj. benzodiazepinů, β-blokátorů, fenylalaninu a jeho blokováných a neblokováných derivátů a dipeptidu. Ze získaných dat je patrné, že pořadí testovaných kolon v tandemovém uspořádání má zásadní vliv na rozlišení enantiomerů studovaných chirálních sloučenin, přičemž jejich retence byla ovlivněna pouze nepatrně. V rámci této práce bylo ukázáno, že TeicoShell a NicoShell kolony jsou vhodné pro vývoj vysoce účinných a velmi rychlých enantioselektivních metod v SFC pro strukturně odlišné chirální sloučeniny. V následné optimalizaci podmínek se podařilo separovat enantiomery vybraných testovaných analytů na základní linii během jedné minuty.

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky (číslo grantu: 20-19655S).

- [1] Wang C., Tymiak A. A., Zhang Y.: *Supercrit. Fluid Chromatogr.*, 153-172 (2017).
 [2] Akchich A., Charton J., Lipka E.: *J. Chromatogr. A* 1588, 115-126 (2019).

1Po06**CYCLIC VOLTAMMETRY STUDY OF SELECTED IRON(II) BASED COMPLEXES WITH PYRIDYLBENZIMIDAZOLE LIGANDS**Eva Melníková¹, Miroslav Gál¹, Olívia Dakošová¹, Barbora Brachňáková², Ivan Šalitros²¹*Department of Inorganic Technology, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Bratislava SK-81237, Slovakia; miroslav.gal@stuba.sk*²*Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Bratislava SK-81237, Slovakia*

Two tridentate (L1=2,6-bis(1-(3,5-di-tert-butylbenzyl)-1H-benzimidazol-2-yl)pyridine and L2=2,6-bis(1-(4-tert-butylbenzyl)-1H-benzimidazol-2-yl)pyridine) and one didentate ligand (L3=1-(4-tertbutylbenzyl)-2-pyridine-2-yl-1H-benzimidazol) were used for the synthesis of eight mononuclear Fe(II) compounds 1-8 containing miscellaneous counter ions [1]. Electrochemical measurements were carried out using a three-electrode electrochemical cell system for cyclic voltammetry (CV). The reference electrode (RE), Ag|AgCl|1M LiCl, was separated from the measured solution by a salt bridge. The working electrode (WE) was glassy carbon disc electrode. The counter electrode (CE) was a platinum wire in the shape of a spiral. Oxygen was removed from the solution by passing a stream of argon for at least 15 min. before the start of experiments and then at least 1 min before each repetition. All electrochemical experiments were performed in 0.1 M anhydrous tetrabutylammonium hexafluorophosphate (TBAPF6) dissolved in dry acetonitrile. Acetonitrile was dried over molecular sieve for at least 5 days prior experiments. TBAPF6 was dried before beginning of each experimental day for 30 minutes in the vacuum oven and kept in a desiccator throughout the day [1].

The cyclic voltammograms of all studied compounds confirm a quasi-reversible or irreversible electron transfer reaction in adsorbed state in the case of reduction and subsequent oxidation of Fe(II) ion in the moiety structure. Reduction peaks corresponding to the reduction of Fe(II) to Fe(0) are in the case of all studied compounds well visible. On the other hand, the corresponding oxidation peaks are not fully developed due to the kinetics of the redox reaction, which is affected mainly by ligands and

adsorption of reactants and products on the electrode surface [1].

The adsorption of oxidation and reduction form on the electrode surface was proved by the linear dependence of the respective cathodic (i_c) and anodic (i_a) peak heights on the scan rate; $i_c, i_a = f(v)$ (where v is the scan rate). The peaks corresponding to the reduction or oxidation of respective ligands are in the case of all compounds more pronounced probably due to the better acceptability to the electrode surface compare to central iron cation. The reduction or oxidation peaks of ligand moieties in the reported compounds are more pronounced probably due to the better acceptability to the electrode surface compare to corresponding complex cations [1].

This research was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contracts No. APVV-17-0149 and APVV-17-0183.

[1] Brachnakova B., Koziskova J.A., Kozisek J., Melnikova E., Gal M., Herchel R., Dubaj T., Salitros, I.: *Dalton Transactions* 49 (48) 17786 (2020)

1Po07

CHARAKTERIZÁCIA ELEKTROCHEMICKÉHO SENZORA PRE STANOVENIE INZULÍNU PRIPRAVENÉHO METÓDOU KOLOIDNEJ LITOGRAFIE

Radka Gorejová¹, Ivana Šišoláková¹, Ondrej Petruš², Jana Shepa¹, Renáta Oriňaková¹

¹*Prírodovedecká fakulta Univerzity Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11, 040 01 Košice, ivana.sisolakova@upjs.sk*

²*Ústav materiálového výskumu Slovenskej akadémie vied, Watsonova 47, 040 01 Košice*

Niklové materiály (nemodifikované Ni elektródy, elektródy modifikované NiNPs a nanočasticami oxidu nikelnatého (NiONPs)) je možné aplikovať v širokom spektre oblastí. Nikel disponuje dobrou vodivosťou a v porovnaní s inými kovmi je ekonomicky výhodnejší. Zároveň bol preukázaný katalytický vplyv niklu na oxidáciu inzulínu z dôvodu tvorby NiOOH⁻ v alkalickom prostredí [1].

Táto práca je zameraná na charakterizáciu povrchu elektrochemického senzora modifikovaného niklovými kavitami pripravenými metódou koloidnej litografie, ktorá zabezpečí podstatne vyššiu homogenitu povrchu a reprodukovateľnosť v porovnaní s použitím niklových nanočastíc. Elektrochemický senzor

bol pripravený depozíciou Ni filmu do medziguľového priestorukoloidnej masky, čím po rozpustení PS vznikli Ni kavity s priemerom ~500 nm. Povrch elektród bol charakterizovaný pomocou SEM a AFM. Priemer pripravených kavit bol približne 500 nm a hĺbka vypočítaná z AFM bola 190 ± 4 nm a zo SEM 188 nm. Aktívna plocha pripraveného senzora bola vypočítaná pomocou Randles-Ševčíkovej rovnice a stanovená metódou cyklickej voltampérometrie. Bolo vypočítané, že po vylúčení kavit na vodivé sklo vzrástla aktívna plocha takmer dvojnásobne (1,5 násobne, radšej to daj v %) z $1,87 \text{ cm}^2$ (čisté vodivé sklo) na $2,89 \text{ cm}^2$ (vodivé sklo modifikované kavitami). Na základe charakterizácie povrchu pripraveného senzora a výpočtu elektrochemickej plochy predstavuje vodivé sklo modifikované niklovými nanokavitami vhodného kandidáta pre elektrochemickú detekciu inzulínu.

Táto práca vznikla za podpory projektu Vyšehradského fondu číslo 22020140 a projektu APVV-PP-COVID-20-0036.

[1] Šišoláková I., Hovancová J., Oriňaková R., Oriňak A., Trnková L., Garcia D., Radoňák J.: *Bioelectrochemistry*.130 (2019).

1Po08

MODERNÍ TECHNOLOGIE VE VÝZKUMU A OCHRANĚ KULTURNÍHO A UMĚLECKO-HISTORICKÉHO DĚDICTVÍ

Tomáš Ingr¹, Lukáš Kučera², Tomáš Opletal², Karel Lemr²

¹*Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 1192/12, 77146 Olomouc, Czech Republic*

²*Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 1192/12, 77146 Olomouc, Czech Republic tomas.ingr@upol.cz*

V současné době je ve fyzikálním, chemickém i materiálovém výzkumu využíváno velké množství rozdílných technik sloužících pro analýzu a charakterizování mnoha typů vzorků. Tyto vzorky mohou být jak organického, tak anorganického původu s různorodým prvkovým složením. Velikost takových vzorků je od mikroskopických rozměrů až po nanosvět.

Moderní fyzikální a chemické metody je možné využít v oblasti kulturního a umělecko-historického dědictví nejen pro kvalitnější umělecko-historický výzkum, ale také pro zajištění vhodné péče o umělecká díla či

případnou restaurátorskou práci. Jedním z hlavních výsledků této práce je miniaturizace odebíraných vzorků z uměleckých děl. Velikost odebíraných vzorků je na hranici mikroskopické oblasti a v mikrogramových množstvích. Propojení rozdílných spektroskopických (infračervená, Ramanova, EDS, ...) a mikroskopických (optická, elektronová) technik umožňuje přesné stanovení složení jednotlivých vrstev a barev vzorku, ze kterých je dílo složeno. Z těchto informací je pak možné zjistit odkud pocházejí pigmenty, které autor díla použil pro namíchání barev. Současně tyto analýzy přinášejí více pochopení o tehdejších uměleckých technických postupech.

Tato práce vznikla za pomoci projektu: OA ITI – ARTECA: Pokročilé fyzikálně-chemické metody ve výzkumu a ochraně kulturního a uměleckého dědictví (CZ.02.1.01/0.0/0.0/17_048/0007378).

1Po09

REDOXNÍ CHOVÁNÍ CHENODEOXYCHOLOVÉ A CHOLOVÉ Kyseliny v oblasti pozitivních a negativních potenciálů

Kristýna Jelsíková¹, Jan Klouda¹, Karolina Schwarzová-Pecková¹

¹Univerzita Karlova, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Hlavova 8, 128 43 Praha 2, kristyna.jelsikova@natur.cuni.cz

Žlučové kyseliny vznikají jako produkty metabolismu cholesterolu v těle savců. Jejich strukturním základem je nasycené steroidní jádro a karboxylová skupinapřítomná v alifatickém postranním řetězci na C₁₇ tohoto jádra. Jejich rozmanitost je dána hydroxylovými a karbonylovými skupinami navázanými na steroidní skelet[1].

Žlučové kyseliny jsou považovány za elektrochemicky neaktivní molekuly, jelikož funkční skupiny jsou vázány na nasycené strukturní motivy. Případná elektrochemická aktivita je indukována zavedením dvojných vazeb a navázáním funkčních skupin na steroidní jádro [2]. Tento postup je možné použít u žlučových kyselin, které obsahují 7 α -hydroxylovou skupinu v prostředí acetonitril–kyselina chloristá [2,3].

Tato práce se zabývala zkoumáním elektrochemického chování cholové a chenodeoxycholové kyseliny na borem dopované diamantové elektrodě. V prostředí acetonitril–kyselina chloristá můžeme pozorovat odezvu v anodické

oblasti při *ca* +1,25 V (vs. Ag/AgNO₃ v acetonitrilu). Po této chemické aktivaci zmíněných žlučových kyselin je možné pozorovat odezvu v katodické oblasti. Pro tuto odezvu je důležité, aby měření probíhalo v přítomnosti kyslíku a na elektrodu byl v prvním kroku aplikován velmi pozitivní potenciál *ca* +2,0 V (vs. Ag/AgNO₃ v acetonitrilu). Při tomto potenciálu dochází na elektrodě k rozkladu vody a tvorbě HO• radikálů. Katodická odezva chenodeoxycholové kyseliny se nachází při potenciálu *ca* -0,40 V a u cholové kyseliny *ca* -0,30 V. V příspěvku bude dále diskutován možný redoxní mechanismus a také možnosti analytického využití těchto signálů.

Výzkum by podpořen Grantovou agenturou České republiky (projekt GAČR 19-11268S), Specifickým univerzitním výzkumem (SVV260560) a Grantovou agenturou Univerzity Karlovy (projekt GAUK 362621).

- [1] Haslewood G.A., *Journal of Lipid Research*, 8, 535 (1967).
- [2] Klouda J., Berek J., Nesměrák K., Schwarzová-Pecková K.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 47, 384 (2017).
- [3] Klouda J., Nesměrák K., Kočovský P., Berek J., Schwarzová-Pecková K., *Bioelectrochemistry*. 134, 107539 (2020).

1Po10

ELEKTROCHEMICKÉ VLASTNOSTI 3- FLUOROFENMETRAZINU

Eliška Jiroušková^{1,2}, Romana Sokolová¹, Radomír Čabala³

¹Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., Dolejškova 3, 182 23 Praha 8, Česká republika, e-mail: eliska.jirouskova@jh-inst.cas.cz

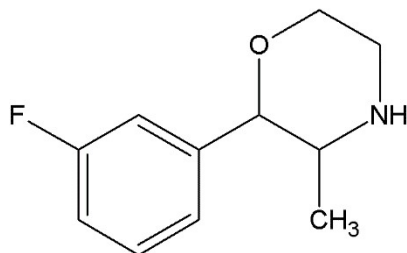
²Univerzita Karlova, Přírodovědecká fakulta, Albertov 6, 128 43 Praha 2, Česká republika

³Univerzita Karlova, 1. Lékařská fakulta, Kateřinská 1660/32, 12108 Praha 2, Česká republika

Na trhu se v dnešní době objevují nové psychoaktivní látky, které se nenachází na seznamu zakázaných látek, a jsou proto zneužívány jako alternativa klasických drog. Existuje mnoho derivátů, proto je složité jednotlivé látky detekovat v rámci toxikologického screeningu biologického materiálu.¹

3-fluorofenmetrazin (2-(3-fluorofenyl)-3-methyl-morfolin, 3-FPM) byl na českém trhu zaznamenán v roce 2014. Jedná se o fluorovaný analog fenmetrazinu, známého také pod názvem Preludin. Tato látka byla v 50. letech 20. století

komerčne dostupná jako lék na obezitu. Z jejého užívání sešlo zejména z důvodu návykovosti. 3-FPM lze sehnat na internetu, prodává se ve formě prášku, krystalů, případně i tablet.^{2,3}



Obr. 1 Chemická štruktúra 3-FPM

K rozpoznání 3-FPM v lidském těle je třeba znát možné metabolity. Na reakčním mechanismu se podílí přenos elektronů, proto byly studovány elektrochemické vlastnosti této látky. Znalost oxidačních a redukčních produktů by mohla usnadnit určení metabolismu. K rozeznání těchto produktů byly využity analytické chromatografické metody. UV-Vis a IČ spektroechemie významně přispěla k určení redoxních produktů.

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 19-03160S.

- [1] Meyer M.R., *Arch Toxicol.* **90**, 2421 (2016).
 [2] Grumann C, Huppertz L.M., Bisel P., Angerer V., Auwärter V., *Drug Test Anal.* **11**, 1009 (2019).
 [3] Adamowicz P., Gieroń J., *Problems of Forensic Science* **105**, 418 (2016).

1Po11 VÝVOJ A TESTOVANIE INOVATÍVNEJ METÓDY NA STANOVENIE 5-HYDROXY-L-TRYPTOFÁNU PRI DIAGNOSTIKE KOLOREKTÁLNEHO KARCINÓMU

Dominik Juračka¹, Michal Galamboš¹, Zoltán Kracszenits², Darina Tóthová¹

¹*Katedra jadrovej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, dominik.juračka@uniba.sk*

²*Biont, a.s., Karloveská 63, 842 29 Bratislava*

Rakovina hrubého čreva a konečníka (CRC) patrí medzi najčastejšie diagnostikovaný typ rakoviny. Hlavným problémom je neskorá diagnostika, ktorá je často spôsobená psychickým blokom pacienta. Ten je vyvolaný strachom z pomerne invazívnych metód, akouje napríklad kolonoskopia. V čase stanovenia diagnózy má 25 – 30% pacientov vzdialené metastázy a ďalších 40% pacientov má regionálne ochorenie lymfatických uzlín, čo riziko vzdialených

metastáze viac zvyšuje [1]. V našej práci sa pokúšame vyvinúť a optimalizovať neinvazívnu metódu diagnostiky CRC, pomocou sledovania koncentrácie 5-hydroxytryptofánu (5-HTP) v telesných tekutinách. 5-htp vykazuje potenciálne využitie ako jeden z markerov CRC. Výsledkom aktuálnej fázy experimentov je optimalizovaná metóda na stanovenie 5-HTP v moči.

- [1] Prochotský, A., *Karcinóm hrubého čreva a konečníka*, Bratislava: Litera medica, 2006, s.97

1Po12 GLYCOPROFILING OF THE SARS-COV-2 SPIKE GLYCOPROTEIN

Jaroslav Katrlík¹, Lucia Pažitná¹, Paras Kundalia¹, Kristína Kianičková¹, Marek Nemčovič¹, Peter Baráth¹, Zuzana Pakanová¹

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

Coronavirus spike (S) glycoprotein promote virus entry into the cells using ACE2 receptors. S glycoprotein is an important target of antibodies and vaccines. S glycoprotein comprises two functional subunits responsible for binding to the host cell receptor (S1 subunit) and fusion of the viral and cellular membranes (S2 subunit) [1]. S1 subunit is more exposed at the viral surface than S2 and is a subject of immune response.

In this work we employed two analytical approaches, lectin-based glycoprotein microarray (MA) and mass spectrometry MALDI-TOF/TOF to determine the glycan pattern on a recombinant SARS-CoV-2 spike glycoprotein S1 expressed in HEK293 mammalian cells. MALDI MS provided identification of N-glycans presented on the S1 glycoprotein after their enzymatic release. Lectin-based MA enabled mapping the composition of glycan shell of S1 glycoprotein by determination of the interactions of biologically accessible glycans with panel of lectins, a special class of proteins selectively recognizing glycan structures. The results obtained by both methods were complementary and in accordance. Our results are also in agreement the data on glycan composition of SARS-CoV-2 S1 glycoprotein reported by other research groups [2,3]. The glycomic studies are important in relation to the understanding of SARS-CoV-2 acting, vaccine development and COVID-19 treatment.

Acknowledgment: APVV PP-COVID-20-0051, APVV-19-0093, VEGA 2/0137/18. This publication was

created with the support of the Operational Program Integrated Infrastructure for the project CEMBAM - Center for Medical Bioadditive Research and Production, ITMS: 313011V358, co-financed by the European Regional Development Fund.

- [1] Walls A.C. et al.: *Cell*, 181, 281 (2020).
 [2] Watanabe Y. et al.: *Science*, 369, 330 (2020).
 [3] Shajahan A. et al.: *Glycobiology*, 30, 981 (2020).

1Po13 GLYKOPROFILÁCIA PĽÚCNEHO TKANIVA

Kristína Kianičková¹, Lucia Pažitná¹, Paras Kundalia¹, Peter Baráth¹, Zuzana Pakanová¹, Filip Květoň¹, Pavol Janega², Jaroslav Katrlík¹

¹Chemický ústav SAV, Dúbravská cesta 9, 84538, Bratislava

²Ústav patologickej anatómie LF UK a UNB, Sasinkova 4, 81108, Bratislava
 chemkian@savba.sk

Pľúca sú dôležitým orgánom, ktorý je súčasťou dolných dýchacích ciest. Z morfológického hľadiska sú pravé pľúca tvorené tromi lalokmi, ľavé pľúca dvomi. Priedušky po vstupe do pľúc tvoria bronchiálny strom. Funkčnou jednotkou pľúcneho tkaniva je pľúcny lalôčik. Pľúca majú vlastný, tzv. malý krvný obeh, v ktorom dochádza k výmene plynov [1].

Pokiaľ je našim cieľom sledovať zmeny v glykoproteínoch tkanivových vzoriek, je možné zvážiť prácu s fixovanými tkanivovými vzorkami. Najčastejším spôsobom fixácie je chemické zosieťovanie formalínom s následným zaliatím vzorky do parafínu, ale je možné použiť napríklad aj fixáciu etanolom.

Lektíny sú proteíny špecificky viažuce glykánové štruktúry. Lektínová histochemia je metóda, ktorá sa používa na vyfarbovanie tkanív s využitím lektínov, pričom metóda bola využitá pri identifikovaní a špecifikácii glykotypov bunkových populácií vo vzorkách tkaniva zdravých pľúc [2].

Naším cieľom je posunúť profilovanie glykánových štruktúr v pľúcnom tkanive na ďalšiu úroveň analýzy. Venovali sme sa glykoproteínovému tkanivu zdravých pľúc a optimalizácii tohto procesu, ktorý zahŕňa množstvo krokov vrátane spôsobu fixácie tkaniva, extrakcie glykoproteínov a glykánovej analýzy metódami MS a lektínovou microarray. Táto práca je dôležitá pre ďalší výskum sledovania zmien glykánovej štruktúry pľúcneho tkaniva súvislosti s ochorením COVID-19, ako

aj s inými ochoreniami dýchacej sústavy (napr. chronická obštrukčná choroba pľúc).

Táto práca bola podporená grantami APVV PP-COVID-20-0051 a COST CA16113 a Ministerstvom zdravotníctva Slovenskej republiky v rámci projektu s registračným číslom 2019/7-CHÚSAV-4. Táto publikácia vznikla vďaka podpore v rámci Operačného programu Integrovaná infraštruktúra pre projekt: CEMBAM - Centrum medicínskeho bioaditívneho výskumu a výroby, ITMS: 313011V358, spolufinancovaný zo zdrojov Európskeho fondu regionálneho rozvoja.

- [1] Internetový zdroj:
<http://www.szsp.sk/images/phocagallery/sk1213/--elearning--/Funkcna-anatomia-dychacej-sustavy.pdf> [11.6.2021]
 [2] Barkhordari, A et al.: *JMol Histol.*35, 147-156 (2004).

1Po14 MATERIÁLOVÉ HODNOCENÍ VYBRANÝCH MAGNETICKÝCH A NEMAGNETICKÝCH FRAKCIÍ POPELA PO SPALOVÁNÍ UHLÍ S OHLEDEM NA OBSAHY MAJORITNÍCH SLOŽEK

Filip Kovár^{1,2} a Lucie Bartoňová¹

¹Fakulta materiálově-technologická VŠB-TUO, 17 listopadu 15, Ostrava, Česká Republika

²Institut environmentálních technologií, VŠB - TUO, 17. listopadu 15/2172, 70800 Ostrava Poruba

Tematika zpracování průmyslových odpadních materiálů se postupně stává rozhodující oblastí výzkumu, protože kromě získaných hodnotných produktů zmírňuje také problém s odstraňováním těchto odpadů a zároveň také napomáhá šetření cenných přírodních zdrojů. Fluidní elektrárny ročně produkují obrovské množství tuhého odpadu, jako je např. ložový popel či úletový popílek. Vzhledem k proměnlivému složení a vlastnostem však tyto popely/popítky (nebo jejich frakce) vyžadují odlišné přístupy k jejich dalšímu technologickému využití.

V práci byly studovány zrnitostní frakce UP a LP pocházející z fluidní elektrárny, kde bylo hnědé uhlí spalováno s odsiřovacím aditivem. Tyto zrnitostní frakce byly podrobeny suché magnetické separaci ve vibrofluidním stavu. Vyšší účinnost magnetické separace byla zjištěna v případě LP ve srovnání s UP. V rámci LP účinnost separace navíc rostla i s rostoucí velikostí zrn frakce; nejvyšší účinnost ze všech separovaných vzorků tedy byla zjištěna v hrubozrnné frakci LP.

Magnetický podíl s vyšším obsahem Fe₂O₃ by mohl posloužit např. jako výchozí materiál pro přípravu pevné složky suspenzí používaných pro rozdrůžování uhlí (příp. i jiných surovin). Zbylé frakce po odseparování magnetického podílu by pak mohly být použity ve stavebnictví; vzhledem k vysokému obsahu (CaO + SO₃) v jemnozrnnějších frakcích LP by v úvahu připadalo např. využití při výrobě maltovin.

Tato práce byla podpořena Doktorskou grantovou soutěží VSB – Technická univerzita Ostrava, reg. č. CZ.02.2.69/0.0/0.0/19_073/0016945 v rámci Operačního programu Výzkum, vývoj a vzdělávání, v rámci projektu DGS/TEAM/2020-014 „Materiálové a energetické využití odpadů“ byly rovněž dosaženy výsledky v rámci studentského projektu č. SP2021/41 a infrastruktury ENGREGAT č. LM2018098.

1Po15 APPLICATION OF MICROMANIPULATION AND LASER DESORPTION IONIZATION MASS SPECTROMETRY IN ANALYSIS OF PEA SEED COAT

Petra Krejčí^{1*}, Monika Cechová-Zajacová¹, Petr Smýkal², Jana Balarynová², Petr Bednář¹

¹Department of Analytical Chemistry, Faculty of Science, Palacký University, 17. listopadu 12, Olomouc, 771 46, Czech Republic

²Department of Botany, Faculty of Science, Palacký University, Šlechtitelů 27, 783 71, Olomouc, Czech Republic

*correspondence: petra.v.krejci@gmail.com

Laser Desorption Ionization Mass Spectrometry (LDI-MS) is frequently used for direct surface analysis of plant samples including seeds [1]. Combination of LDI-MS and multivariate statistics (MVS) has been used for investigation of physical dormancy of legumes [1,2]. Electronically controlled (EC) micro-milling is nowadays a popular method for treatment of various materials [3]. In this communication we combine EC peeling of the outermost layers of pea seed coats (PSC) in micrometer scale and consequent LDI-MS of exposed layers.

PSC of matured and dry seeds of JI64 and JI92 genotypes differing in dormancy were selected according to the previous studies [1,2]. Small pieces of seed coats were fixed on microscope slides, the outermost (cutin) layers were peeled using micromanipulators Quick Pro (Micro-Support) under microscopic control. Outer cutin layers (OCL) were peeled off in exact depths - 2 or 5 or 10 µm. The peeled and untreated pieces

of PSC were analysed by LDI-MS (Synapt G2-S, Waters). Data obtained by LDI-MS were analysed by MVS for identification of markers of particular seed coat layers and pea genotypes.

Significant decrease of normalized signals (NS) of fatty acids (FA) in peeled samples with respect to the untreated ones was observed. Removal of cutine layers exposed deeper PSC layers. NSs of polyphenols and potassium adducts of cell wall fragments (sugar chains) were higher in peeled PSCs compared to untreated ones. These results suggest that combination of EC peeling with LDI-MS is efficient tool for study of seed composition in relation with seed dormancy mysteries.

Support of the Czech Science Foundation (No. 19-07155S), Operational Programme Research, Development and Education – European Regional Development Fund, project No. CZ.02.1.01/0.0/0.0/16_019/0000754 and Palacký University Olomouc (IGA_PrF_2021_021) is gratefully acknowledged.

- [1] Cechová M. et al.: *Int. J. Mol. Sci.* 18, 2196 (2017).
- [2] Cechová M. et al: *Anal. Bioanal. Chem.* 411, 1169-1180 (2019).
- [3] Xu Q. *Micromachines for Biological Micromanipulation. Springer International Publishing AG, Cham, Switzerland, 2018. (ISBN 978-3-319-74620-3)*

1Po16 PRÍPRAVA ČISTÝCH SUBSTANCIÍ METÓDOU VYTESŇOVACEJ PREPARATÍVNEJ CHROMATOGRAFIE

Róbert Kubinec¹, Jaroslav Blaško¹, Ľudmila Gabrišová², Oliver Macho², Rastislav Hrčka¹, Ľubomíra Duháčková¹, Janka Kubincová³, Marek Kunštek³, Jozef Višňovský⁴

¹Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, robert.kubinec@uniba.sk

²Slovenská technická univerzita v Bratislave - Strojnícka fakulta, Vazovova 5, 81243 Bratislava

³Národné poľnohospodárske a potravinové centrum, Výskumný ústav potravinársky, Biocentrum Modra, Kostolná 7, 900 01 Modra

⁴SynthCluster, s.r.o., Moyzesova 15, 900 01 Modra

Použitie vytesňovacej chromatografie v porovnaní s elučnou chromatografiou má výhodu približne o dva poriadky vyššej vzorkovej kapacity, čo ju predurčuje na použitie v preparatívnom resp. priemyselnom rozmere.

V práci sa porovnáva použitie vytesňovacej kvapalinovej chromatografie s rektifikačnou

destiláciou za zníženého tlaku. Oba systémy boli použité na izoláciu jednotlivých zložiek z esenciálneho pomarančového oleja, s dôrazom najmä na čistotu D-limonénu a koriandrolu ako hlavných zložiek v testovanom oleji. Vytesňovacou chromatografiou bola získaná vyššia čistota pre D-limonén, zatiaľ čo pre linalool sa vyššia čistota získala destiláciou s použitím rektifikačnej kolóny. Pri vytesňovacej chromatografii sa ako sorbent použil chromatografický silikagél so zrnitosťou 15-40 μm a ako vytesňovadlo bola použitá zmes metanol-voda. Jednotlivé frakcie boli kvantifikované pomocou rýchlej plynovej chromatografie s plameňovo-ionizačnou detekciou.

Tento príspevok vznikol s podporou Agentúry na podporu výskumu a vývoja projektom APVV-18-0282, APVV-20-0317 a za finančnej podpory projektov ITMS-313011V336 a ITMS2014+: 313021X329, spolufinancovaný zo zdrojov Európskeho fondu regionálneho rozvoja.

1Po17 PREDÚPRAVA A STANOVENIE ZMESI PAH V RÔZNYCH TYPOCH VZORIEK

Elena Kupcová¹, Barbora Benická¹

¹Univerzita Mateja Bela v Banskej Bystrici, Fakulta prírodných vied, Katedra chémie, Tajovského 40, 974 01 Banská Bystrica, elena.kupcova@umb.sk, barbora.benicka@umb.sk

Polycyklické aromatické uhľovodíky (PAH, z angl. polyaromatic hydrocarbons) predstavujú skupinu perzistentných organických látok, ktoré sú najmä v dôsledku antropogénnej činnosti prítomné vo všetkých zložkách životného prostredia. K najzávažnejším rizikám PAH patrí ich karcinogenita, ktorá stúpa s narastajúcim počtom jadier, pričom maximum dosahuje pri uhľovodíkoch s piatimi kondenzovanými benzénovými jadrami, potom opäť klesá [1]. PAH vznikajú pri nedokonalom spaľovaní fosílnych palív, pričom sa dostávajú do životného prostredia ako kontaminanty pôd a ovzdušia, odkiaľ sa môžu dostať aj priamo do potravinového reťazca. Príčinou výskytu PAH v potravinách môžu byť okrem kontaminácie zo životného prostredia tiež niektoré technologické postupy používané pri ich spracovaní ako je údenie, grilovanie alebo vypaľovanie.

Dôkladný monitoring prítomnosti PAH vo vzorkách životného prostredia a kontrola dodržiavania limitov stanovených pre PAH v

potravinách vyžaduje presné a citlivé analytické metódy pre ich stanovenie. Najčastejšie využívanou metódou pre stanovenie zmesi PAH je vysokoúčinná kvapalinová chromatografia v spojení so spektrofometrickým a fluorescenčným detektorom. Metóda má napriek vysokej citlivosti určité limity, na základe ktorých nemôže byť univerzálne použitá pre rôzne typy matric. Tento faktor možno eliminovať použitím vhodného postupu predúpravy vzorky, ktorý zabezpečí nielen prekoncentráciu analytov, ale aj redukciu nežiaducich vplyvov matrice na samotné stanovenie.

Predmetom príspevku je vývoj postupu predúpravy rôznych typov vzoriek pred samotným stanovením zmesi PAH pomocou HPLC-DAD/FLD metódy.

Práca bola podporená projektom VEGA 1/0110/19.

[1] Walker, C.H. (2009). Organic Pollutants: An Ecotoxicological Perspective, Second Edition (2nd ed.). CRC Press.
<https://doi.org/10.1201/9781420062595>

1Po18 OPTIMALIZÁCIA DERIVATIZÁCIE GLYKÁNOV URČENÝCH K ANALÝZE Kyseliny sialovej zo vzoriek séra

Filip Kvetoň, Zuzana Pakanová, Marek Nemčovič, Ján Mucha

Chemický ústav SAV, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, filip.kveton@savba.sk

Glykozylácia proteínov je významná post-tranzlačná modifikácia. Má zásadný vplyv na ich funkciu, stabilitu a vlastnosti. Zmeny v glykozylácii boli pozorované v súvislosti s dedičnými metabolickými poruchami (tzv. primárne poruchy glykozylácie), ako aj u mnohých iných ochorení (nádorových, imunologických, neurologických a pod. - sekundárne príčiny aberantnej glykozylácie) [1]. Rozlíšenie väzbovosti kyseliny sialovej (2,3-; 2,6-) môže byť využité ako potencionálny diagnostický nástroj [2]. Vďaka cukrovému zvyšku sme schopní vyvíjať nové stratégie pre terapeutické a diagnostické využitie ešte pred rozvojom devastáčnych ochorení.

V našej práci sme porovnávali dva rôzne prístupy pre derivatizáciu terminálnej kyseliny sialovej, aby sme boli schopní rozlíšiť zastúpenie 2,3- a 2,6- väzby. V prvom prípade sme využívali zmes (1:1) *N*-(3-dimetylamino-propyl)-*N'*-etylkarbodiimid hydrochlorid (EDC) a 1-hydroxybenzotriazol hydrát (HOBt). V druhom

prístupe boli využívané dimetylamín, HOBt a EDC [3]. Ďalším krokom v tomto postupe bol prídavok hydroxidu amónneho. Vzorky boli následne spracované HILIC metódou, nanosené na MALDI platňu a merané pomocou MALDI TOF hmotnostného spektrometra. V oboch prípadoch sme dosiahli uspokojivé výsledky. K výhodám nami navrhovaného postupu s využitím len EDC/HOBt patrí predovšetkým časová nenáročnosť, ktorá sa prejaví v šetrení energií, chemikálií a práce personálu, čo sa odrazí aj na financiách, ktoré môžu byť neskôr využité v ďalšom bádani.

Podakovanie

Táto práca bola podporovaná Ministerstvom zdravotníctva Slovenskej republiky v rámci projektu s registračným číslom 2019/7-CHÚSAV-4, projektami APVV-18-0336 a VEGA2/0060/21. Táto publikácia vznikla vďaka podpore v rámci Operačného programu Integrovaná infraštruktúra pre projekt: Dlhodobý strategický výskum a vývoj zameraný na výskyt Lynchovho syndrómu v populácii SR a možnosti prevencie nádorov spojených s týmto syndrómom, kód ITMS: 313011V578, spolufinancovaný zo zdrojov Európskeho fondu regionálneho rozvoja.

- [1] Rodriguez E. et al.: *Nature Communications* 12, article number 1270 (2021)
 [2] Holst S. et al.: *Anal. Chem.* 88, 5904-5913 (2016)
 [3] Reiding K.R.: *Anal. Chem.* 86, 5784-5793 (2014)

1Po19

PERSPEKTÍVNE IMOBILIZAČNÉ PLATFORMY NA BÁZE POKROČILÝCH 2D NANOROZMERNÝCH MXÉNOVÝCH ROZHRAŇÍ PRE NÁVRH (BIO)SENZOROV

Lenka Lorencová¹, Veronika Pinková Gajdošová¹, Štefánia Hrončeková¹, Tomáš Bertók¹, Peter Kasák², Ján Tkáč¹

¹Chemický ústav Slovenskej akadémie vied, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, Lenka.Lorencova@savba.sk, Veronika.Gajdosova@savba.sk, Stefania.Hroncekova@savba.sk, Tomas.Bertok@savba.sk, Jan.Tkac@savba.sk

²Centrum pre pokročilé materiály, Univerzita v Katare, P.O. Box 2713, Dauha Katar, Východná Ázia, peter.kasak@qu.edu.qa

Sľubné 2D nanomateriály „MXény“ sa stali predmetom záujmu kvôli svojim špecifickým vlastnostiam a vrstvenej štruktúre poskytujúcej množstvo alternatív v zložení a následnom využití pre rôzne aplikácie. V pilotnej štúdií sme skúmali schopnosť $Ti_3C_2T_x$ MXénu detegovať elektrochemicky dôležité analyty (O_2 , H_2O_2 a NADH). $Ti_3C_2T_x$ preukázal pozoruhodnú elektrokatalytickú aktivitu pri redukcii H_2O_2 na

nM úrovni. V snahe zlepšiť jeho stabilitu a redoxné správanie sme následne modifikovali MXén nanočasticami Pt. Senzor na báze nanokompozitu $Ti_3C_2T_x/Pt$ dokázal detegovať okrem H_2O_2 i malé organické molekuly na nanomolárnej úrovni¹. Elektrochemická štúdia tiež potvrdila významný rozdiel v hustote záporného náboja na povrchu MXénu a rovnako v elektrokatalytickej aktivite v závislosti od leptanta (HF alebo LiF/HF) použitého pri príprave MXénov. V snahe zúžitkovať MXén v biosenzoroch je potrebné sa sústreďovať ďalej na modifikáciu jeho rozhraní. Pre tento cieľ a tiež na potlačenie nešpecifických interakcií sme modifikovali rozhrania MXénu využitím aryldiazóniových solí s derivátmi nesúcimi sulfo- alebo karboxybetaínovú skupinu². Naša ďalšia stratégia spočívala v kombinácii $Ti_3C_2T_x$ s chitozánom na imobilizáciu enzýmu sarkozín oxidáza a následnú detekciu sarkozínu (potenciálny biomarker rakoviny prostaty) s medzou detekcie 18 nM³. V nasledujúcich rokoch predpokladáme exponenciálny nárast počtu afinitných biosenzorov založených na MXéne. Navrhnuté MXénové rozhrania budú pravdepodobne vynikať i v glykoprofilácii rakovinových biomarkerov.

Autori ďakujú za finančnú podporu z projektu APVV 17-0300 a z projektov Ministerstva zdravotníctva Slovenskej republiky No. 2018/23-SAV-1 a 2019/68-CHÚSAV-1 a takisto z projektu VEGA 2-0137-18.

- [1] Lorencova L., Gajdosova V., Hroncekova S., Bertok T., Blahutova J., Vikartovska A., Parrakova L., Gemeiner P., Kasak P., Tkac J.: *Electroanalysis* 31, 1833-1844 (2019).
 [2] Lorencova L., Gajdosova V., Hroncekova S., T. Bertok, Jerigova M., Velic D., Sobolciak P., Krupa I., Kasak P., Tkac J.: *Front. Chem.* 8, 553 (2020).
 [3] Hroncekova S., Bertok T., Hires M., Jane E., Lorencova L., Vikartovska A., Tanvir A., Kasak P., Tkac J., *Processes* 8, 580 (2020).

1Po20**ELECTROCHEMICAL PROPERTIES OF A LAB-MADE SCREEN-PRINTED SENSORS WITH CHEMICALLY DEPOSITED BORON DOPED DIAMOND ELECTRODE**

Oleksandr Matvieiev¹, Renáta Šelešovská¹, Marian Vojs², Pavol Michniak², Marin Vrška², Jaromíra Chýlková¹

¹University of Pardubice, Faculty of Chemical Technology, Institute of Environmental and Chemical Engineering, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Czech Republic, oleksandr.matvieiev@student.upce.cz

²Slovak University of Technology in Bratislava, Faculty of Electrical Engineering and Information Technology, Institute of Electronics and Photonics, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, Slovak Republic

Boron doped diamond electrode (BDDE) represents a promising tool for electroanalytical chemistry. In recent years, its use has been increasing due to its excellent electrochemical properties as wide available potential window, low background current, good chemical resistance, low current noise, resistance to passivation, and high hardness [1, 2]. Due to the requirement of fast monitoring of drug levels in patient's body fluids, in addition to bulk electrodes, screen-printed electrodes (SPE) have been developed. Their main advantages consist in low price, possibility of easy mass production thanks to which they can be used as disposable sensors, in simple and tailored design, and in their applicability in smart portable analyzers or flow systems [3]. In this contribution, the electrochemical properties of lab-made SPE with chemically deposited BDDE (LM-SP/BDDE) were investigated and compared with bulk BDDE and commercially available SP/BDDE.

The performed studies were focused on the width of the potential window, investigation of the voltammetric behavior of redox markers usually used for this purposes ($[\text{Ru}(\text{NH}_3)_6]^{3+/4+}$ and $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-/4-}$), and also the repeatability of peak currents recorded on both individual SP/BDDE and between multiple SP/BDDEs. The application possibilities of the tested sensors were verified in the analysis of the anti-inflammatory drug lornoxicam.

This work was supported by the grant project of The Czech Science Foundation (project No. 20-01589S) and by The University of Pardubice (projects No. SGSFChT_2021_003), Operational Program Integrated Infrastructure for the project: "Strategic research in the field of SMART monitoring, treatment and preventive protection against coronavirus (SARS-

CoV-2)", Project no. 313011ASS8, co-financed by the European Regional Development Fund, and VEGA grant No. 1/0554/20.

- [1] Xu J., Granger M.C., Chen Q., Strojek J.W., Lister T.E., Swain G.M.: *Anal. Chem.* 69, 591A (1997).
- [2] Baluchova S., Danhel A., Dejmekova H., Ostatna V., Fojta M., Schwarzova-Peckova K.: *Anal. Chim. Acta* 1077, 30 (2019).
- [3] Kondo T., Sakamoto H., Kato T., Horitani M., Shitanda I., Itagaki M., Yuasa M.: *Electrochem. Commun.* 13, 1546 (2011).

1Po21**DETERMINATION OF TRACE ELEMENTS IN PURE MANGANESE MATRIX USING INDUCTIVELY COUPLED PLASMA OPTICAL EMISSION SPECTROMETRY (ICP-OES)**

Frederika Mišíková¹, Lucie Borovská¹, Anna Krejčová¹

¹Institute of Environmental and Chemical Engineering, The University of Pardubice, Studentská 573, CZ-532 10 Pardubice, Czech Republic, frederika.misikova@student.upce.cz

The overcoming of spectral interferences in the inductively coupled plasma optical emission spectrometry (ICP-OES) method is not a trivial task especially in the case of measuring trace amounts in excess of an element with a rich emission spectrum. Spectral interferences caused by overlapping emission lines can make the whole analysis impossible. These interferences can be eliminated in various ways, for example: by choosing a different analytical line, by selecting a higher order of the spectrum, by mathematical correction, or by a more time-demanding sample treatment procedure based on separation of analytes from an undesirable element in excess [1, 2].

In this study, a reliable method for routine analysis of traces of Ca, K, Mg, N, Cu, Fe, Zn in pure manganese matrices using ICP-OES was developed. The suitable spectral lines as little as possible affected by the presence of excess manganese were searched. The method was validated using artificial standards prepared from MnSO_4 of purity for analysis and spectroscopic standards containing (in mgL^{-1}): 3250 Mn, 0.05 - 0.10 - 0.15 of Ca, K, Mg, Na, and 0.005 - 0.010 - 0.0150 Cu, Fe, Zn, and Ultraspec® certified reference materials. The standard addition method was used for the evaluation of results.

- [1] Mermet J.M., Trassy C.: *Spectrochimica Acta.*

36B, 4 (1981).

[2] Boumans P.W.J.M.: *Spectrochimica Acta*. 36B, 3, (1981).

1Po22

POTENCIÁL KOMBINÁCIE HYDROFILNEJ INTERAKČNEJ KVAPALINOVEJ CHROMATOGRAFIE A IÓNOVEJ CHROMATOGRAFIE V SEPARÁCIÍ GLYKOPEPTIDOV

Katarína Molnárová¹, Petr Kozlík¹

¹ *Katedra analytickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Karlova, Hlavova 2030/8, 128 00, Praha 2, katarina.molnarova@natur.cuni.cz*

Glykozylácia proteínov je jedna z najdôležitejších posttranslačných modifikácií proteínov, ktorá zahŕňa komplexnú sériu enzymatických krokov, ktorých výsledkom je tvorba oligosacharidov viazaných na proteín s rôznymi biologickými funkciami [1]. Abnormálna glykozylácia proteínov hrá kľúčovú rolu pri rôznych ochoreniach, ako napr. pri onkologických ochoreniach, pri reumatoidnej artritíde a pri vrodených chorobách imunitného systému [2]. Analýza glykopeptidov je náročná úloha hlavne z dôvodu mikro- a makroheterogenity glykozylovaných proteínov [3]. Hydrofilná interakčná kvapalinová chromatografia (HILIC) je výhodnou alternatívou k chromatografii na reverznej fáze pre separáciu intaktných glykopeptidov pred ich identifikáciou pomocou hmotnostnej spektrometrie. Kvôli zložitosti separačného procesu v HILIC móde, je pre každú stacionárnu fázu potrebná dôkladná optimalizácia metódy.

Cieľom našej práce bolo preukázať potenciál novo zavedených ACE HILIC kolón na analýzu glykopeptidov. Medzi tieto kolóny patrí HILIC-A (obsahujúca nemodifikovaný silikagél), HILIC-B (obsahujúca aminopropylom modifikovaný silikagél) a HILIC-N (obsahujúca polyhydroxylom modifikovaný silikagél) kolóna. Spomedzi týchto kolón prvé dve vykazovali kombináciu rozdeľovacieho a iónovo výmenného separačného mechanizmu.

Táto práca vznikla s finančnou podporou Grantovej agentúry Českej republiky (GAČR 19-18005Y). Ďalej bola z časti financovaná z projektu špecifického vysokoškolského výskumu (SVV260560) a z Grantovej agentúry Univerzity Karlovej (GAUK 336421).

[1] Varki, A., Cummings, R. D., Esko, J. D., Stanley, P., Hart, G., Aebi, M., Darvill, A. G., Kinoshita, T., Packer, N. H. *Essentials of Glycobiology*, 3rd

ed. (2017).

[2] Saraswathy, N., Ramalingam, P. *Concepts and techniques in genomics and proteomics* (2011).

[3] Struwe, W. B., Robinson, C. V.: *Curr. Opin. Struct. Biol.*, 58, 241-248 (2019)

1Po23

GC-MS ANALÝZA OXIDAČNÍCH PRODUKTŮ CHENODEOXYCHOLOVÉ Kyseliny

Jana Nádvorníková¹, Petr Barták¹, Jana Skopalová¹

¹ *Katedra analytickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, jana.nadvornikova02@upol.cz*

Chenodeoxycholová kyselina patrí medzi primárne žľučové kyseliny, ktoré sú produktom metabolismu cholesterolu u savců, a ktoré sú tvorené v jätrech. Sekundárne žľučové kyseliny vznikajú naopak ve střevech transformáci primárnych žľučových kyselín pôsobením baktérií [1]. Možnosti stanovení primárnych žľučových kyselín v biologických matricích sú značne omezené vzhľadom k absencii chromoforu alebo fluorescenčných či elektrochemicky aktívnych skupín. Najčastejšie je využívané metódy založených na enzymatických reakciách, alebo kombinácie plynové, respektíve kapalinové chromatografie s hmotnostne spektrometrickou detekciou [2].

Studium oxidačných produktů primárnych žľučových kyselín, zejména pak chenodeoxycholové kyseliny, je dôležité s ohľadom na diagnostiku onemocnění spôsobených nejrůznějšími defekty v jejich biosyntéze. Vzhľadom k tomu, že samotná chenodeoxycholová kyselina je elektrochemicky neaktívna, oxidaci musí predchádzať dehydratačný krok katalyzovaný kyselinou chloristou v prostredí acetonitrilu [3].

Cieľom práce bolo vyvinout rychlou a spohehlivou GC-MS metódu vhodnou k analýze produktů získaných elektrochemickou oxidaci chenodeoxycholové kyseliny. Vzorky získané elektrochemickou oxidaci na platinové elektrodě byly před analýzou derivatizovány trimethylsilylačním činidlem. Byl identifikován majoritní oxidační produkt, jehož struktura byla potvrzena srovnáním se synteticky připraveným standardem. Na základě NMR analýzy bylo zjištěno, že u identifikovaného oxidačního produktu dochází k přesmyku u C-D kruhu steroidního skeletu a vzniká tak spirosloučenina.

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky (projekt 19-11268S) a Univerzity Palackého v Olomouci (projekt IGA_PrF_2021_021).

- [1] Russell D.W., Setchell K.D.: *Biochemistry*, 31, 4737 (1992).
- [2] Makin H.L.J., Shackleton C.H.L., Honour J.W., v knize: *Steroid Analysis* (Makin H.L.J., Gower D.B., ed.), kap. 3. Springer, London 2010.
- [3] Klouda J., Berek J., Kočovský P., Herl T., Matysik F.-M., Nesměrāk K., Schwarzová-Pecková K.: *Electrochem. commun.* 86, 99 (2018).

1Po24**STABILITY AND APPLICABILITY OF FOUR POPULAR 3D PRINTING MATERIALS IN ELECTROANALYTICAL CHEMISTRY**

Marta Choínska^{1,2}, Tomáš Navrátil¹, Jan Fischer², Hana Dejmková², Luděk Míka³, Viliam Kolivoška¹

¹J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry of the Czech Academy of Sciences, Dolejškova 3, 182 23 Prague 8, Czech Republic, tomas.navratil@jh-inst.cas.cz

²Charles University, Faculty of Science, Department of Analytical Chemistry, Albertov 6, 128 43 Prague 2, Czech Republic

³Charles University, Faculty of Science, Department of Teaching and Didactics of Chemistry, Albertov 6, 128 43 Prague 2, Czech Republic

3D printing materials are novel and popular materials in electrochemistry, used for manufacturing cells, sensors, electrodes, reactors, etc. [1]. They are widely used mainly for tailored, fast, inexpensive, and easy preparation of final products [2]. However, direct and long-time contact of 3D printing materials with various solutions can cause consequent deterioration of manufactured equipment or substantial changes in electrochemical properties of analytical signals. Therefore, it is important to investigate these limitations in detail. Our research is focused on four popular 3D printing materials: Elastic, Clear, PLA, and PET; its aim is to investigate the material limitations and the changes in their properties in inorganic electrolytes at various pH and in organic solvents (e.g., potential windows in acidic, neutral, and basic media, sensitivity, reproducibility, and reversibility of $\text{Cd}^{2+/0}$, $[\text{Ru}(\text{NH}_3)_6]^{3+/2+}$, $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-/3-}$ voltammetric signals). Each of investigated materials brings specific (dis)advantages related to (un)-applicability of the products fabricated from it. Long-term exposition to above-mentioned media affects negligibly the potential windows, but negatively affects recorded signals. The most stable behavior in organic solvents exhibits the Elastic and, on the contrary, the PLA was the most soluble material.

These results are valuable for further application of 3D printing materials in electrochemistry.

The authors gratefully acknowledge financial support by Czech Science Foundation project No. 20-01589S and SVV-260560 project, and GAUK project No. 373521 (M.Ch.).

[1] Abdalla A., Patel B.A., *Curr. Opin. Electrochem.* 2078 (2020).

[2] Escobar J.G., Vaneckova E., Lachmanova S.N., Vivaldi F., Heyda J., Kubista J., Shestivska V., Spanel P., Schwarzova-Peckova K., Rathousky J., Sebechlebska T., Kolivoska V.: *Electrochim. Acta* 360, 136984 (2020).

1Po25**ELECTROCHEMICAL METHODS FOR DETERMINATION OF FENTANYL, ITS ANALOGUES AND DERIVATIVES**

Marta Choínska^{1,2}, Tomáš Navrátil¹, Jan Langmaier¹, Jana Skopalová³, Vítězslav Maier³

¹J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry of the Czech Academy of Sciences, Dolejškova 3, 182 23 Prague 8, Czech Republic, tomas.navratil@jh-inst.cas.cz

²Charles University in Prague, Faculty of Science, Department of Analytical Chemistry, UNESCO Laboratory of Environmental Electrochemistry, Albertov 6, 128 43 Prague 2, Czech Republic

³Palacký University Olomouc, Faculty of Science, Department of Analytical Chemistry, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, Czech Republic

Fentanyl is one of the most potent drugs in anesthesia. This synthetic narcotic analgesic, which can act as an agonist of opioid receptors, is 100times more potent than morphine and exhibits fewer adverse effects than other opiates and opioids. It is widely used as a strong painkiller for cancer and chronic pain, as well as anesthetic drug in surgery [1].

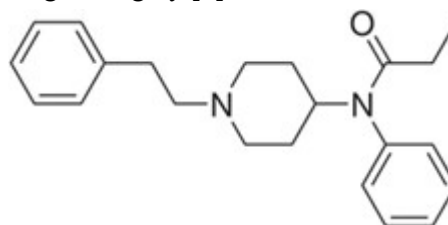


Fig. 1 Fentanyl structure

Fentanyl and its analogues are also potent opioid illicit drugs, which easily cause overdosing and death. Due to the high risk of abuse, new methods of their determination are needed. Among others, electrochemical methods seem to represent promising tool for the determination of fentanyl, its analogues, derivatives, and metabolites in real

samples, in the presence of most occurring interfering substances [2].

Electroanalytical methods provide fast, simple, and inexpensive tools with high efficiency, low limits of detections, high selectivity, and sensitivity. Moreover, they can be easily modified to improve their efficiency and to determine newly prepared analogues. They may be also coupled with other techniques, like HPLC or electromembrane extraction [1, 3].

This contribution summarizes the electrochemical and coupled methods developed so far for the determination of fentanyl, its derivatives, analogues, and their metabolites and the achieved results.

The authors gratefully acknowledge financial support by Czech Science Foundation project No. 20-07350S and SVV-260560 project, and GAUK project No. 373521 (M.Ch.).

- [1] Elbardisy H.M., Foster C.W., Cumba L., Antonides L.H., Gilbert N., Schofield C.J., Belal T.S., Talaat W., Sutcliffe O.B., Daabees H.G., Banks C.E.: *Anal. Methods-UK* 11, 1053, (2019).
 [2] Glasscott M.W., Vannoy K.J., Iresh Fernando P.U.A., Kosgei G.K., Moores L.C., Dick J.E.: *Trac-Trends Anal. Chem.* 132, 116037 (2020).
 [3] Ahmar H., Fakhari A.R., Tabani H., Shahsavani A.: *Electrochim. Acta* 96, 117 (2013).

1Po26

SPECTROSCOPIC BINDING STUDIES OF NEUROBLASTOMA DISEASE MARKERS BY NOVEL THIOPHENE BASED RECEPTORS- PRECURSORS FOR THE ELECTROCHEMICAL SENSORS' PREPARATION

Jakub Marián Páles^{1,2}, Karolína Salvadori¹, Tatiana V. Shishkanova², Petra Cuřínová¹

¹*Institute of Chemical Process Fundamentals of the CAS, Department of Analytical Chemistry, Rozvojova 2/135, 165 02 Prague 6 - Suchbát, Czech Republic, email: pales@icpf.cas.cz*

²*University of Chemistry and Technology Prague, Department of Analytical Chemistry, Technická 5, 160 00 Prague 6, Czech Republic*

The key role of anionic species in biological and environmental issues is well recognized and the problems associated with disrupted balance of anion in the nature represent currently a hot topic. Besides that, multitude of the negatively charged species are also known as precursors of various illnesses and the monitoring and sensing of these structures could be useful in diagnostic [1]. Nowadays one group of promising and successful

material are electrochemical sensors. These sensors using conducting polymers such as polypyrrole (PPy), polythiophene (PT) etc. are low-cost, portable and successful instruments generally adopted in clinical analysis [2].

Therefore, the aim of our research is preparation of anionic receptors utilizing the thiophene skeleton as polymerizable carrier. New receptors were designed and synthesized according to required binding features. The anionic metabolites, known as tumour markers of neuroblastoma such as homovanillic acid (HVA) and vanillylmandelic acid (VMA) were screened by the monomeric thiophene-based receptors with urea binding site. Complexation properties and association constants were then evaluated using the NMR and UV-Vis titration experiments. Finally, receptor selectivity to HVA and VMA among other carboxylates was assessed.

- [1] J.L. Sessler, P.A. Gale, W.-S. Cho, C. Royal Society of, Anion receptor chemistry, RSC Publishing, London, 2006.
 [2] A. Nemiroski, D.C. Christodouleas, J.W. Hennek, A.A. Kumar, E.J. Maxwell, M.T. Fernández-Abedul, G.M. Whitesides, *Proc Natl Acad Sci U S A*, 111 (2014) 11984-11989.

1Po27

GLYKOPROFILÁCIA SÉR POMOCOU MICROARRAY A MALDI-TOF MS U PACIENTIEK S RAKOVINOU PRSNÍKA

Veronika Pinková Gajdošová¹, Lucia Pažitná¹, Filip Květoň¹, Eduard Janeč¹, Zuzana Pakanová¹, Lenka Lorencová¹, Peter Baráth¹, Jaroslav Katrlík¹, Ján Tkáč¹

¹*Chemický ústav, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, Bratislava 845 38, Slovenská republika, gajdosova30@gmail.com*

Rakovina prsníka spôsobuje druhý najvyšší počet úmrtí, pričom malígna transformácia a nádorová progresia je často spojená so zmenou glykozylácie. Glykány (komplexné sacharidy kovalentne naviazané na proteíny), riadia a podporujú bunkové interakcie, interakcie hostiteľa a patogénu, bunkovú signalizáciu, progresiu ochorenia i tvorbu metastáz [1]. V súčasnosti je dopyt po efektívnej diagnostike menej invazívnou cestou t.j. analýzou sér.

V pilotnej štúdií sme pomocou lektínovej microarray študovali interakcie molekúl na povrchu čipu pričom ďalšou aplikovanou metódou bola MALDI-TOF MS. V microarray experimente boli vzorky spotované na epoxidové sklíčko a inkubované s biotinylovanými lektínmi ktoré predstavujú proteíny vysoko špecifické pre

glykány a následne boli inkubované s fluorescenčnou značkou konjugovanou so streptavidínom.

V MALDI-TOF MS experimente sme aplikovali prístup podľa Reidinga [2] v ktorom sme merali hmotnostný rozdiel kyseliny sialovej, kde α 2,6-viazaná kyselina sialová podlieha esterifikácii a amidácii, zatiaľ čo α 2,3-viazaná kyselina sialová zhromažďuje intramolekulárny laktón a výsledkom je strata vody. Uvoľnené N-glykány zo vzoriek boli opracované HILIC metódou a následne merané.

V tejto štúdií sme uskutočnili komplexný prístup pre glykoproláciu sér pacientiek s rakovinou prsníka a kontrolných skupín pomocou lektínovej microarray, MALDI-TOF MS analýzy a štatistickej analýzy. Cieľom tejto štúdie bolo otestovať a overiť, či sérový profil proteínov môžu naznačovať prítomnosť rakoviny prsníka.

Táto publikácia vznikla vďaka podpore v rámci Operačného programu Integrovaná infraštruktúra pre projekt: CEMBAM - Centrum medicínskeho bioaditívneho výskumu a výroby, ITMS: 313011V358, spolufinancovaný zo zdrojov Európskeho fondu regionálneho rozvoja. Radi by sme poďakovali za finančnú podporu z projektu 4019914.

- [1] Clark, B. Z., Onisko, A., Assylbekova, B., Li X., Bhargava R., D. J. Dabbs: *Modern pathology: an official journal of the United States and Canadian Academy of Pathology*, 32, 354-366, (2019).
- [2] Reiding, K. R., Blank, D., Kuijper, M., Deelder, A. M., Wuhrer, M.: *Analytical Chemistry*, 86, 5784-5793, (2014).

1Po28 VLIV NUKLEOTIDOVÉ SEKVENČE, SEKUNDÁRNY STRUKTURY A PROSTŘEDÍ NA VOLTAMETRICKÉ CHOVÁNÍ HOMOCYTOSINOVÝCH BLOKŮ

Hana Pivoňková, Miroslav Fojta

Biofyzikální ústav AV ČR, v.v.i., Královopolská 135,
Brno, Česká republika; hapi@ibp.cz

Již dlouho je známo, že nukleové kyseliny jsou elektrochemicky aktivní [1]. Pomocí různých elektrochemických metod dokážeme rozlišit jednořetězcovou a dvouřetězcovou DNA (nebo RNA), a to na základě odlišné dostupnosti bází na povrchu elektrod. Zjistili jsme, že kromě sekundární struktury jsou interakce DNA s elektricky nabitými povrchy výrazně ovlivněny také zastoupením jednotlivých typů bází, primární strukturou (sekvencí) DNA a složením

pufrů (pH a přítomnost a koncentrace různých solí). V poslední době je velká pozornost věnována (vedle dlouhých molekul chromozomální nebo plasmidové DNA) studiu krátkých syntetických oligonukleotidů, které jsou bohaté na guanin (G) [2] nebo cytosin (C), tvořící intramolekulární nebo intermolekulární G4-kvadruplexy nebo cytosinové i-motivy, které jsou citlivé na pH roztoku. V případě delších bloků cytosinu (snáze tvořících i-motivy) dochází k jejich redukcí i při vyšších hodnotách pH, než jaké jsou potřeba k redukcí izolovaných cytosinových zbytků. Toto chování kvalitativně koreluje s tendencí homo-C bloků tvořit struktury obsahující hemiprotonované páry C⁺•C. Zřetelný je také vliv přítomnosti ostatních bází. Je zřejmé, že procesy na povrchu elektrod jsou velmi komplexní a vyžadují další zkoumání.

Tento výzkum byl podpořen projektem GAČR č. 20-03187S

- [1] E. Palecek and M. Bartosik, *Chem Rev* 2012, 112, 3427-3481.
- [2] P. Vidlakova, H. Pivonkova, I. Kejnovska, L. Trnkova, M. Vorlickova, M. Fojta and L. Havran, *Anal Bioanal Chem* 2015, 407, 5817-5826.

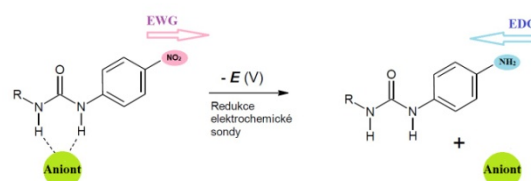
1Po29 STUDIUM VLIVU REDOXNÍ PŘEMĚNY NITRO SKUPINY NA VAZEBNÉ VLASTNOSTI RECEPTORŮ NA BÁZI MOČOVIN

Karolína Salvadori^{1,2,3}, Ludmila Šimková¹, Jiří Ludvík¹, Pavel Matějka², Petra Cuřínová³

¹Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v. v. i., Oddělení molekulární elektrochemie a katalýzy, Dolejškova 3, 182 23 Praha 8, Česká republika

²Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav fyzikální chemie, Technická 5, 160 00 Praha 6, Česká republika

³Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i., Oddělení analytické chemie, Rozvojova 2/135, 165 02 Praha 6 - Suchbátka, Česká republika; e-mail: salvadori@icpf.cas.cz



Anionty se v přírodě přirozeně vyskytují, avšak jejich rovnováha značně závisí na činnosti

člověka. Řada z nich přitom patří k závažným environmentálním polutantům a látkám negativně ovlivňujícím organismy. K nejrozšířenějším polutantům pak patří také fosforečnany^[1], o nichž je známo, že způsobují eutrofizaci vod, přičemž jejich nedostatečné odstraňování z tělních tekutin může vést k vážným zdravotním problémům.

Z těchto důvodů se cílem našeho výzkumu stala příprava jednoduchých polyfunkčních receptorů, které ve své struktuře disponují močovinným vazebným místem a sulfonamidickou funkcí, podporující odtah elektronové hustoty z komplexačního místa. Vazebné schopnosti receptorů byly studovány v kompetitivním prostředí (DMSO) za použití NMR a UV-Vis titrací. Experimentální výsledky potvrdily značnou selektivitu receptoru vůči fosforečnanům ve srovnání s jinými biologicky důležitými anionty, jako jsou Cl⁻, NO₃⁻ a HSO₄⁻.^[2] Pro praktické účely je rovněž vhodné uvážit způsob „recyklace“ vazebného motivu, a tak jsme se rozhodli do struktury receptoru začlenit redukovatelnou –NO₂ skupinu. Tento motiv pak v molekule slouží nejen jako chromofor, usnadňující snímání komplexace aniontů, ale redoxní transformace této sondy se jeví vhodná pro elektrochemickou degradaci komplexu. Redukce nitro skupiny pak byla studována pomocí polarografie, cyklické voltametrie a spektroeletrochemických měření.

Poděkování: Práce byla podpořena grantem GAČR 20-07833S a v rámci projektu Specifického vysokoškolského výzkumu A2_FCHI_2021_002.

- [1] Sessler, J. L.; Gale, P. A.; Cho, W. Anion receptor chemistry; The Royal Society of Chemistry: UK, 2006.
- [2] Salvadori, K.; Šimková, L.; Císařová, I.; Sýkora, J.; Ludvík, J.; Cuřínová, P.: *ChemPlusChem* **2020**, 85 (7), 1401–1411.

1Po30 ELEKTROCHEMICKÁ OXIDACE A VOLTAMETRICKÉ STANOVENÍ FENTANYLŮ

Radek Jerga, Dana Štolbová, Monika Zajacová
Cechová, Petr Barták, Jana Skopalová

*Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta,
Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12,
771 46 Olomouc, jana.skopalova@upol.cz*

Fentanyl a jeho deriváty furanlylfentanyl, sufentanyl, carfentanyl a thiofentanyl jsou syntetické opioidy vyvinuté pro použití v akutních případech analgezie a chronické bolesti např. v

pokročilých stádiích nádorových onemocnění. Stále častěji však dochází k jejich nezákonnému zneužívání, zejména ve směsích s heroinem, v nichž zvyšují psychotropní účinek drogy. Nízký terapeutický index fentanylu a jeho derivátů bývá příčinou neúmyslného, avšak často smrtelného předávkování nelegálními drogami s příměsí fentanylu a jeho analogů [1].

Pro stanovení fentanylů lze využít jejich elektrochemickou oxidaci. V neutrálních a alkalických vodných roztocích poskytují všechny testované deriváty na elektrodě ze skelného uhlíku (GCE) voltametrickou odezvu s potenciálem maxima kolem 0,8 V proti SCE. Elektrolýzou za konstantního potenciálu a analýzou oxidačních produktů pomocí HPLC-MS a GC-MS byla jako hlavní reakce prokázána oxidační *N*-dealkylace. Anodický děj byl využit pro diferenčně pulzní voltametrické stanovení fentanylu a jeho analogů. Meze detekce se pohybovaly v rozmezí 0,08 μmol/l pro carfentanyl až 0,55 μmol/l pro furanlylfentanyl. Adsorpce fentanylů na povrchu GCE umožnila vypracovat transferovou metodu voltametrické analýzy. Po akumulaci analytu v roztoku vzorku je elektroda přenesena do roztoku základního elektrolytu, kde se adsorbovaná látka potenciostaticky zoxiduje na elektroaktivní produkt, který je následně detegován cyklickou square-wave voltametrií. Metoda byla úspěšně použita pro analýzu fentanylu v moči.

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky (projekt 20-07350S) a Univerzity Palackého v Olomouci (projekt IGA_PrF_2021_021).

- [1] Shoff E. N., Zaney M. E., Kahl J. H., Hime G. W., Boland D. M.: *J. Anal. Toxicol.* **41**, 1 (2017).

1Po31 SEPARATION IN FLOW-BASED METHODS: CURRENT STATUS

Petr Solich, Petr Chocholouš, Dalibor Šatinský

*Laboratory of Flow analysis, Department of Analytical
Chemistry, Faculty of Pharmacy, Charles University,
Hradec Králové, Czech Republic
E-mail: solich@faf.cuni.cz*

Fifteen years after the first application of short monolithic separation columns in low-pressure flow-based methods, the Sequential Injection Chromatography (SIC) and its alternatives have already shown their great potential for analytical chemistry (1). The research in the field of stationary phases for liquid chromatography has accelerated during the last decade, and several

new types of chromatography columns emerged, including new types of monolithic columns as well as core-shell particle columns (fused core particles technology). Recently column packed with new type of "multilayered" organic-inorganic hybrid silica particle YMC-Triart has been developed to solve specific problems of separations in flow-based methods (2). Still some technical drawbacks persist to empower widespread applications of typical separation columns in low-pressure flow-based method, the dominating issue appears to be the availability of the convenient pumps. Several examples of application of SIC will be shown (3), and the future potential of SIC and related techniques will be discussed.

Acknowledgements

This work was supported by the STARSS project (Reg. No. CZ.02.1.01/0.0/0.0/15_003/0000465) co-funded by ERDF.

- [1] D. Šatinský, P. Solich, P. Chocholouš, R Karliček: *Anal. Chim. Acta* 499, 205 (2003).
- [2] P. Chocholouš, R. Gil, C.C. Acebal, P. Solich: *J.Sep.Sci.* 40, 1225 (2017).
- [3] P. Chocholouš, L., Šatinský, P. Solich: *Talanta* 204, 272 (2019).

1Po32

AMPEROMETRICKÝ SENZOR DETEKČIE INZULÍNU PRIPRAVENÝ METÓDOU KOLOIDNEJ LITOGRAFIE

Ivana Šišoláková¹, Ondrej Petruš², Jana Shepa¹, Renáta Oriňaková¹

¹Prírodovedecká fakulta Univerzity Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11, 040 01Košice, ivana.sisolakova@upjs.sk

²Ústav materiálového výskumu Slovenskej akadémie vied, Watsonova 47, 040 01Košice

Diabetes mellitus predstavuje jedno z najrozšírejších a finančne najnáročnejších ochorení súčasnosti. Z toho dôvodu je nevyhnutné zamerať sa na vývoj lacného, presného a rýchleho senzora, ktorý by bol schopný diagnostikovať toto ochorenie včas. Elektrochemické senzory predstavujú vhodných kandidátov pre diagnostiku diabetu spĺňajúc požadované kritéria, pričom práve elektrochemická detekcia predstavuje rýchly, lacný a nenáročný spôsob stanovenia analytu[1].

Táto práca sa zaoberá vývojom vysoko citlivého a presného elektrochemického senzora na detekciu inzulínu, ako jedného z možných prístupov diagnostiky diabetu. Elektrochemický

senzor bol pripravený depozíciou Ni filmu cez koloidnú masku na ITO sklo. Rozpustením koloidnej masky vznikli kavity s priemerom ~500 nm. Koloidná litografia sa ukázala ako vhodný spôsob prípravy elektrochemického senzora, najmä z dôvodu zabezpečenia vysokej homogenity povrchu. Elektrochemická detekcia inzulínu na pripravenom senzore bola študovaná metódou cyklickej voltampérometrie a na základe vykonaných meraní boli vypočítané analytické charakteristiky vyvíjaného senzora, ktorý disponoval nízkym limitom detekcie 156 nM, vysokou citlivosťou 1,032 $\mu\text{A}/\mu\text{M}$ a širokým lineárnym rozsahom 500 nM – 10 μM . Na základe uvedených charakteristík môžeme tvrdiť, že pripravený senzor je vhodný na elektrochemickú detekciu inzulínu.

Táto práca vznikla za podpory projektu Vyšehradského fondu číslo 22020140 a projektu APVV-PP-COVID-20-0036.

- [1] Šišoláková I., Hovancová J., Oriňaková R., Oriňak A., Garcia D., Shylenko O., Radoňák J.: *Electroanalysis*.31, 1 (2018).

1Po33

VYUŽITÍ INDOXYLACETÁTU JAKO SUBSTRÁTU PRO ACETYLCHOLINESTERÁZU

Šárka Štěpánková¹, Kristýna Votočková¹, Katarína Svrčková¹

¹Katedra biologických a biochemických věd, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice

Acetylcholinesteráza (AChE) je serinová hydroláza, ktorá rozkladá neurotransmitter acetylcholin, a tým ukončuje neurotransmisii. Zvýšená aktivita AChE môže spôsobovať poruchy prenosu signálu v cholinergním nervovém systéme a je pravdepodobne jednou z príčin rozvoje Alzheimerovy choroby [1].

Pro stanovení aktivity a inhibice AChE se nejčastěji používá spektrofotometrická Ellmanova metoda, která jako substrát využívá acetylthiocholin a chromogenem je kyselina 5,5'-dithio-bis-2-nitrobenzoová [2].

V této práci byl jako substrát použit indoxylacetát, jehož hydrolyzou katalyzovanou AChE vzniká barevný produkt vykazující absorpční maximum při vlnové délce 670 nm [3]. Cílem této práce bylo nalezení vhodných reakčních podmínek pro spektrofotometrické stanovení aktivity AChE s využitím indoxylacetátu jako substrátu. Byly testovány

různé koncentrace substrátu a množství enzymu v reakční směsi.

Bylo prokázáno, že v porovnání s Ellmanovou metodou má použití indoxylacetátu jako substrátu AChE několik výhod: do reakční směsi není potřeba přidávat chromogen a nedochází k inhibici substrátem ani při vyšších koncentracích. Nevýhodou ovšem je delší čas enzymatické hydrolyzy.

Autoři by rádi poděkovali za finanční podporu Fakultě chemicko-technologické Univerzity Pardubice.

- [1] Ballard C.G., Greig N.H., Guillozet-Bongaarts A.L., Enz A., Darvesh S.: *Curr. Alzheimer Res.* 2, 307 (2005).
- [2] Ellman G. L., Courtney K. D., Anders V.: *Biochem.Pharmacol.* 7, 88 (1961).
- [3] Pohanka M., Hrabínová M., Kuca K., Simonato J.-P.: *Int. J. Mol. Sci.* 12, 2631 (2011).

1Po34 INOVAČNÉ PRÍSTUPY V DIAGNOSTIKE KARCINÓMU PROSTATY

Natália Švecová¹, Tomáš Bertók¹, Lenka Lorencová¹, Ján Tkáč¹

¹*Chemický ústav SAV, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, chemnasv@savba.sk*

Karcinóm prostaty je jedným z najčastejšie sa vyskytujúcich typov rakoviny u mužov. Medzi rizikové faktory patrí vek, rodinná anamnéza tohto ochorenia, ako aj prostredie a životný štýl. Vo väčšine prípadov sa u pacientov neobjavujú žiadne typické klinické príznaky [1]. S rastúcou incidenciou tohto ochorenia je preto nevyhnutný vývoj efektívnych a dostatočne senzitivných diagnostických metód.

V súčasnosti sa na detekciu karcinómu prostaty využíva stanovenie hladiny prostatického špecifického antigénu (PSA) v krvnom sére. Zvýšené množstvo tohto proteínu je pozorované aj pri iných ochoreniach, a preto sa súčasný výskum zameriava na štúdium nových markerov, ktoré by poskytl vyššiu citlivosť a špecificitu pri určení diagnózy. Sledovanie glykozylačných zmien biomarkerov, ktoré sú spojené s nádorovou progresiou, má potenciál včasnej diagnostiky. Medzi časté glykozylačné zmeny PSA patria zmeny fukozylácie, sialylácie a zmeny v pomere N-acetylgalaktozámínu. Tieto zmeny je možné sledovať prostredníctvom rôznych metód. Jednou z najčastejších je využitie hmotnostnej spektrometrie [2]. Ďalšie perspektívne metódy zahŕňajú použitie lektínov a exozómov [3].

Autori by radi poďakovali za finančnú podporu získanú od VEGA 2-0137-18 a od Ministerstva zdravotníctva SR pod registračným číslom projektu 2019/68-CHÚSAV-1.

- [1] Sung H., Ferlay J., Siegel R.L., Laversanne M., Soerjomataram I., Jemal A., Bray F.: *CA. Cancer J. Clin.* 71, 209-249 (2021).
- [2] Wang W., Kaľuža A., Nouta J., Nicolardi S., Ferens-Sieczkowska M., Wuhler M., Lageveen-Kammeijer G.S.M., de Haan N.: *Talanta.* 222, 1–8 (2021).
- [3] Tkac J., Gajdosova V., Hroncekova S., Bertok T., Hires M., Jane E., Lorencova L., Kasak P.: *Interface Focus.* 9, 20180077 (2019).

1Po35 APPLICATION OF BORON-DOPED DIAMOND BASED SENSORS FOR FOOD ANALYSIS

Marek Haššo, Alžbeta Benková, Andrea Pinkeová, Miroslava Štefčáková, Olha Sarakhman, Ľubomír Švorc

Slovak University of Technology in Bratislava, Faculty of Chemical and Food Technology, Institute of Analytical Chemistry, Radlinského 9, 812 37, Bratislava, Slovakia, marek.haššo@stuba.sk

Since there is a strong correlation between food and health, in the last few decades the public concerns have been enhanced for food safety. The considerable number of strategies and technologies for the determination of the large spectrum compounds in foodstuff have been proposed. Electrochemical sensing presents several comfortable facilities in this issue such as high sensitivity while giving large linear dynamic range of response; versatility as a consequence of the possibility of simultaneous analysis, extended to a large number of electroactive compounds without tedious and long preparative steps and huge potential for use in on-site investigations [1]. Keeping this knowledge in mind, the main goal of this contribution is to present the possibilities of the usage of electrochemical materials based on boron-doped diamond (BDD) for simple and cost-effective routine screening of organic compound in food matrices [2]. A special attention is paid to the possibilities and limitations of "indirect determination" using BDD sensors [3]. Moreover, our recent achievements in the utilizing of BDD electrodes in amperometric detection coupled to batch injection analysis are also commented. Apart from this, the estimation of the main analytical features (linear dynamic

range, limit of detection, sensitivity) and methods validation is conducted.

This research was supported by the Grant Agency of the Slovak Republic (VEGA No. 1/0159/20), STU Grant Scheme for Support of Young Researchers and Operational Program Integrated Infrastructure for the project: "Strategic research in the field of SMART monitoring, treatment and preventive protection against coronavirus (SARS-CoV-2)", Project no. 313011ASS8, co-financed by the European Regional Development Fund.

- [1] Sarakhman, O., Švorc, E.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* In Press, (2020).
- [2] Haško, M., Sarakhman O., Stanković, D.M., Švorc, E.: *Anal. Methods* 12, 4749 (2020).
- [3] Pinkeová, A.: *Diploma thesis*, FCHPT STU in Bratislava (2021).

1P036 PHOSPHATE-CONTAINING SELF- IMMOLATIVE LINKERS FOR DOUBLE CARGO RELEASE

Markéta Tichotová¹, Petr Šimon², María García Gallardo², Ondřej Baszczyński^{1,2}, Eliška Procházková¹

¹*Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, The Czech Academy of Sciences, Flemingovo nám. 542/2, 166 10 Prague 6, Czech Republic, marketa.tichotova@uochb.cas.cz*

²*Faculty of Science, Charles University, Hlavova 2030/8, 128 43 Prague 2, Czech Republic*

Self-immolation (SI) is a fragmentation of a molecule upon external stimuli. The activated intermediate spontaneously cyclizes while releasing cargo. The phosphorus-based SI linkers stand above the "classical" carbamate linkers. They allow attachment of additional substituent, and, therefore, can be ideal candidates for a double cargo delivery. Moreover, the rate of SI can be tuned by structural modification of the spacer responsible for the SI, e.g. sterically demanding substituent in α -position accelerates the SI significantly [1].

We synthesized a series of phosphate-based SI linkers able to release two phenolic cargos [2]. The SI was initiated by UV light, and the reaction course was monitored by ³¹P NMR spectroscopy with in situ irradiation in real time. Structure of the intermediates was determined in situ combining ³¹P and ¹³C NMR spectra. Modifications of the lactate spacer as well as the cargos allowed us to drive the sequential release of two cargos. As an example, α -hydroxyisobutyrate spacer (Fig. 1) released both phenolic cargos within 25 minutes. This

structure-activity relationship study enabled us to fine-tune the velocity of SI from 1 day up to 5 minutes, thus, greatly widened possible applications of the phosphate-based SI linkers in drug delivery or in development of smart materials.

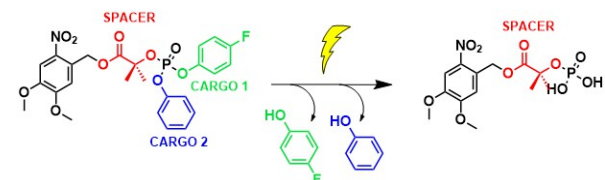


Fig. 1: An example of a α -hydroxyisobutyrate SI spacer studied in this work.

The research was financially supported by the Czech Science Foundation (grant No. 21-23014S).

- [1] Procházková E., Filo J., Cigán M., Baszczyński O.: *Eur. J. Org. Chem.* 2020, 897 (2020).
- [2] Šimon P., Tichotová M., Gallardo M. G., Procházková E., Baszczyński O.: *Chem. Eur. J.* 27, 10.1002/chem.202101805 (2021).

1P037 TWO AND THREE ELECTRODE SETUPS FOR IMPEDANCE BIOSENSING: CHARGE AND IONIC STRENGTH

Jakub Věžník^{1,2}, Jakub Sopoušek³, Libuše Trnková¹, Karel Lacina²

¹*Department of Chemistry, Faculty of Science, Masaryk University, Kamenice 5, Brno, Czech Republic*

²*Central European Institute of Technology, Masaryk University, Kamenice 5, Brno, Czech Republic*

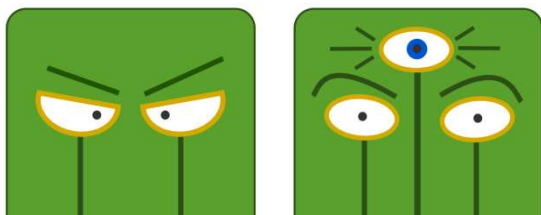
³*Department of Biochemistry, Faculty of Science, Masaryk University, Kamenice 5, Brno, Czech Republic*

jveznik@mail.muni.cz

Current state of the art electrochemical research favours primarily three-electrode systems as this allows researchers to focus solely on the reaction happening on the working electrode. Biamperometry [1], on the other hand, employs two electrodes of the same size and material, surface reaction on the working electrode thus has to be balanced by complementary reaction on the other electrode.

It has been already shown that positively charged proteins immobilised on the electrode can lower the impedance of the system [2]. Our latest work has shown that this behaviour is highly dependent on the ionic strength and concentration of redox probe in the measuring solution [3]. In this contribution we would like to explore how is this

behaviour influenced by two and three electrode setup.



This research has been financially supported by the project CEITEC 2020 (LQ1601), by the Czech Science Foundation, grant nr. 19-16273Y, and by Operational Programme Research, Development and Education – „Project Internal Grant Agency of Masaryk University” (No. CZ.02.2.69/0.0/0.0/19_073/0016943).

- [1] K. Lacina, P. Vanýsek, P. Bednář, L. Trnková, P. Skládal, *ChemElectroChem* 2016, 3, 877–882.
 [2] K. Lacina, J. Sopoušek, V. Čunderlová, A. Hlaváček, T. Václavěk, V. Lacinová, *Electrochem. commun.* 2018, 93, 183–186.
 [3] J. Sopoušek, J. Věžník, J. Houser, P. Skládal, K. Lacina, *Electrochim. Acta* 2021, 388, 138616.

1Po38 ISOLATION OF TRANS-2,CIS-6-NONADIENAL BY FLASH CHROMATOGRAPHY

Veronika Výbohá^{1,2}, Nikola Bakardžiev², Katarína Hroboňová¹

¹*Slovak University of Technology in Bratislava, Faculty of Chemical and Food Technology, Institute of Analytical Chemistry, Radlinského 9, 812 37, Bratislava*

²*Axxence Slovakia s.r.o., Mickiewiczova 9, 81107 Bratislava, Slovakia, veronika.vybohova@axxence.sk*

Trans-2,cis-6-nonadienal makes up the characteristic aroma of cucumber fruit (*Cucumis sativus*), released when its tissues are disrupted. It has been found in various plant materials, such as kiwi, mango, cherries, peppers, rice, tea, and several animal products. *Trans-2,cis-6-nonadienal* is an important commercial odour used in food products as well as a fragrance in cosmetics, perfumes, and detergents. It has shown potential as a bioactive substance affecting insects, yeast, and certain bacteria [1].

Flash chromatography is a technique used to separate and fractionate the mixtures of compounds. It allows larger sample loads to be separated under more selective separation conditions and avoids column contamination and regeneration difficulties. In this work, technique was employed to separate selected aldehyde components from complex matrix containing

alcohols, various acids and their esters, etc.. The plant material containing approx. 30% of natural *trans-2,cis-6-nonadienal* was subjected for flash chromatography using two commercially available columns: Biotage® SNAP Ultra 50g (silica) and Biotage® Sfär C18 D 120g. Different gradient solvent systems were used for the separations on each column. All fractions were analysed using GC-FID. Final fractions of *trans-2,cis-6-nonadienal* (the purity approx. 60%) were obtained. Both fractionation methods were compared.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract number APVV-17-0281.

- [1] Buescher R.H., Buescher R.W.: *Journal of Food Science* 66 (2), 357 (2001).

1Po39 AFFINITY BASED HIGH-THROUGHPUT DETERMINATION OF ABBERANT GLYCOSYLATION IN CANCER

Paras Kundalia¹, Lucia Pažitná, Kristína Kianičková, Jaroslav Katrlík^{1*}

¹*Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dubravska cesta 9, 845 38 Bratislava. chempars@savba.sk*

Glycosylation being a canonical posttranslation modification in eukaryotes is a key cellular mechanism regulating several physiological and pathological functions. Abberant glycosylation is one of the characteristic hallmarks of cancer with increased sialylation, increased branched-glycan structures and overexpression of corefucosylation being some of the prominent manifestations. Serum based biomarkers indicative of cancer are the most desirable form of the biomarkers that can be used for personalized daily care in screening, early and rapid diagnosis, establishing prognosis, monitoring treatment, and detecting relapse in cancer patients. However, considering the colossal diversity demonstrated by glycans, high-throughput methods of glycoprofiling are the need of the hour. Glycans and corresponding carbohydrate-binding proteins or lectins prove to be instrumental in high-throughput glycoprofiling by protein-based glycan arrays. Here we demonstrate glycoprofiling of more than 200 patients diagnosed with different types of cancer by adopting microarray and subsequent glycomic approach.

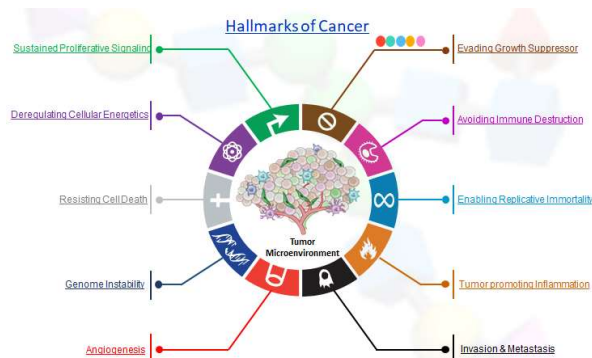


Fig. 1 Hallmarks of Cancer

We would like to acknowledge for the financial support from the projects H2020 ITN synBIOcarb and APVV SK-SRB-18-0028. This publication was created with the support of the Operational Program Integrated Infrastructure for the project Center for Advanced Therapies of Chronic Inflammatory Diseases of the Locomotion System, ITMS: 313011W410, co-financed by the European Regional Development Fund.

- [1] Pinho S. S., Rei A. C.: *Nat. Rev. Cancer*15, 540–555 (2015).
 [2] Ruhaak R. L., Xu. G., Li. Q., Goonatilleke. E., Lebrilla B. C.:*Chem. Rev*118, 7886–7930(2018).

1Po40

DETERMINATION OF SELECTED PESTICIDE RESIDUES IN STRAWBERIES USING GC-MS

Andrea Purdešová¹, Zuzana Kramplová¹, Jozef Sokol¹

¹University of Ss. Cyril and Methodius in Trnava, Faculty of Natural Sciences, Department of Chemistry Nám. J. Herdu 2, SK-917 01, Trnava, Slovak Republic, andrea.purdesova@ucm.sk

Pesticide is a general term that includes a variety of chemical and biological products used to kill

or control living organisms such as rodents, insects, fungi and plants (The Pesticides Safety Directorate, UK 2008b). They are used in agriculture to increasing productivity.

Fast GC-MS method for analysis of then GC amenable pesticides active in electron ionization (EI) mode was developed. Extraction of pesticides using QUEChERS method was done and final extracts were analyzed by fast GC-MS. Validation experiments were realized using matrix-matched standard solutions.

Linearity was evaluated using matrix-matched standard solutions at concentration range 0.01-500 µg/kg with coefficients of determination (R^2) higher than 0.9994. Good recoveries at three studied concentration levels (0.005; 0.01 a 0.1ng/µl) from 70 to 120% with relative standard deviation < 20% were obtained for majority of studied pesticides. The limit of detection (LOD) and limit of quantification (LOQ) were evaluated. Good values of LOD and LOQ ranged from 0.00003 to 0.001 ng/µl obtained. The lowest calibration level (LCL) for majority of studied pesticides 0.001 ng/µl was obtained. The developed and validated method was applied for analysis of real samples of strawberries from local supermarket.

This work has been supported by KEGA No. 025UCM-4/2021.

POSTERY - SEKCIA 2 FYZIKÁLNA CHÉMIA

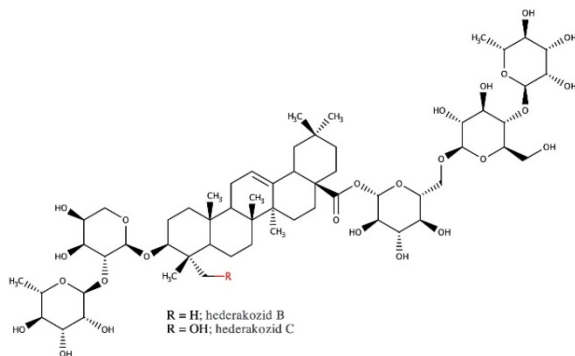
2Po01

ŠTÚDIUM POVRCHOVÝCH VLASTNOSTÍ SAPONÍNŮV IZOLOVANÝCH Z HEDERA HELIX

Martin Bajcura¹, Miloš Lukáč¹

¹Katedra chemickej teórie liečiv, Farmaceutická fakulta, Univerzita Komenského, Kalinčiakova 8, 832 32 Bratislava, Bajcura1@uniba.sk

Saponíny získané z *Hedera helix* majú početné biologické aktivity vrátane antiproliferatívnych, cytotoxických, antibakteriálnych a antifungálnych účinkov [1]. Hederakozid B a C boli extrahované z listov *Hedera helix* a ich čistenie bolo uskutočnené pomocou chromatografie na reverzných fázach.



Obr. 1 Hederakozid B a C

Štruktúrne sa hederakozid C odlišuje od hederakozidu B (Obr. 1) iba prítomnosťou hydroxylovej skupiny na uhlíku 23 aglykónu. Kritická koncentrácia tvorby micel (cmc) je závislá na štruktúre – hederakozid C je hydrofilnejší, preto má hodnotu $cmc = 3,096 \cdot 10^{-4} \pm 6,459 \cdot 10^{-6} \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3}$, ktorá je vyššia v porovnaní s hederakozidom B. Absencia hydroxylovej skupiny v aglykóne hederakozidu B výrazne ovplyvňuje jeho lipofilitu. Hodnota cmc tohto saponínu je preto skoro o jeden poriadok nižšia, v porovnaní s hederakozidom C.

Maximálne zníženie povrchového napätia je rovnako závislé na štruktúre saponínov. Lipofilnejší hederakozid B vykazuje nižšiu hodnotu tejto veličiny ($\gamma_{cmc} = 55,3 \text{ mN} \cdot \text{m}^{-1}$) oproti hederakozidu C.

Meraním závislostí povrchového napätia od koncentrácie tenzidu vo vodných roztokoch bola

stanovená plocha pripadajúca na jednu molekulu saponínu na fázovom rozhraní voda/vzduch (A_{cmc}). Prítomnosť hydroxylovej skupiny v aglykóne saponínov zaberá len malý objem v porovnaní s celkovým objemom molekúl, a preto sa táto štruktúrna zmena prejavila len v zanedbateľnej miere, hodnoty A_{cmc} sú prakticky totožné.

Táto práca vznikla s podporou projektu VEGA: 1/0054/19 a APVV-17-0373.

[1] Gumushan-Aktas, Hatice, and Seyhan Altun.: *Effects of Hedera helix L. extracts on rat prostate cancer cell proliferation and motility*. Oncology letters vol. 12,4. 2985-2991 (2016).

2Po02

A FAST PROCEDURE FOR PRELIMINARY EVALUATION OF THE EFFECTS OF DIFFERENT AGEING TYPES ON THE THERMOOXIDATIVE STABILITY OF MATERIALS

Zuzana Cibulková¹, Anna Vykydalová¹, Tibor Dubaj¹, Peter Šimon¹

¹Faculty of Chemical and Food Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, zuzana.cibulkova@stuba.sk

In many applications of everyday life it is necessary to find the most suitable materials in terms of their thermooxidative stability. Moreover, in practice it is often necessary to examine the effect of different types of ageing or their combinations on the stability of materials. It is obvious that assessing the thermooxidative stability of multiple materials under different conditions is a time-consuming process and it is often impractical to use common procedures in the initial evaluation of the stability. Thus, there is a demand for fast screening methods for evaluating the stability of many materials under the influence of various environmental factors.

In this work we describe a fast procedure for quantifying the effects of gamma radiation, elevated temperature and their combination on the thermooxidative stability of materials. As a model sample, cable insulation made of polyethylene with crosslinking catalyst was studied using non-isothermal DSC measurements. The procedure is based on a complete kinetic analysis of data for the unaged material and data obtained at single heating rate for aged samples. To verify the results of the procedure, the data were compared with those obtained from

complete kinetic analysis based on five heating rates for all samples under study.

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

2Po03

VOLTAMETRICKÉ CHOVÁNÍ DOPAMINU A SEROTONINU NA BOREM DOPOVANÉ DIAMANTOVÉ ELEKTRODĚ

Jan Fischer, Michaela Pejzlová, Simona Baluchová, Karolina Schwarzová

Univerzita Karlova, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO Laboratoř elektrochemie životního prostředí, Albertov 6, 128 43 Praha 2, jan.fischer@natur.cuni.cz

Povrchové modifikace borem dopované diamantové elektrody jsou perspektivní cestou ke studiu elektrochemických dějů. [1] Tato práce popisuje využití tohoto elektrodového materiálu pro studium elektrochemického chování neurotransmiterů, konkrétně dopaminu a serotoninu, v prostředí fosfátem pufovaného fyziologického roztoku a růstového média Neurobasal.

V případě poly-*L*-lysinem modifikované borem dopované elektrody dochází k poklesu proudů a posunu potenciálů oproti O-terminované borem dopované diamantové elektrodě, kdy pro serotonin je změna mnohem výraznější než pro dopamin, a to zejména v prostředí Neurobasalu.

Experimentálně bylo odhaleno, že oxidace dopaminu ve všech zkoumaných prostředích probíhá kvazireverzibilně, neboť poskytuje anodický i katodický pík, oproti tomu se serotonin na borem dopované diamantové elektrodě oxiduje ireverzibilně, tedy poskytuje pouze anodický pík, a to na obou zmíněných modifikacích elektrody.

Dále byl zkoumán vliv přídavku albuminu na voltametrické signály, jeho přítomnost způsobuje posun oxidačních potenciálů neurotransmiterů na O-terminované borem dopované diamantové elektrodě, oproti tomu potenciály na poly-*L*-lysinem modifikované elektrodě zůstávají prakticky neměnné. Na obou elektrodách však dochází k výraznému poklesu voltametrických signálů obou neurotransmiterů.

Tato práce objasnila a potvrdila, že všechny zkoumané faktory, tj. komplexní prostředí Neurobasalu, pokrytí elektrody poly-*L*-lysinem a

přítomnost albuminu, mají výrazný vliv na elektrochemické chování dopaminu a serotoninu.

Tato práce byla finančně podpořena granty Grantové agentury Univerzity Karlovy (projekt GAUK 390119) a Grantové agentury České republiky (projekt GAČR 20-03187S).

[1] Baluchová S., Daňhel A., Dejmková H. Ostatná V., Fojta M., Schwarzová-Pecková K.: *Anal. Chim. Acta* 1077, 30 (2019).

2Po04

IDENTIFIKÁCIA AKRYLAMIDU V ZRNKÁCH KÁVY POMOCOU HMOTNOSTNEJ SPEKTROMETRIE SEKUNDÁRNYCH IÓNOV

Lujza Grambličková, Monika Jerigová

Univerzita Komenského v Bratislave, Přírodovědecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie

Káva patří medzi najviac konzumované nápoje na celom svete. Ide o nápoj pripravovaný z rozomletých kávových zŕn a následným vylúhovaním vo vode. Plody pochádzajú z kávovníka rodu *Coffea*. Kým sa káva dostane k nám ako hotový nápoj, prechádza mnohými procesmi ako sú: zber kávových čerešní, sušenie, triedenie, praženie, lúpanie, atď. My sme sa v tejto bakalárskej práci zamerali práve na proces praženia kávových zŕn, pretože počas tohto procesu dochádza k fyzikálnym a chemickým zmenám a tiež k Maillardovej reakcii. Maillardova reakcia alebo neenzymatické hnednutie je reakcia, v ktorej reaguje sacharid (najčastejšie glukóza alebo fruktóza) s neesenciálnou aminokyselinou (asparagín). Nasleduje sled reakcií a výslednými produktmi sú okrem hnedého sfarbenia aj aróma kávy a toxický akrylamid. Motiváciou práce je identifikovať akrylamid v kávových zrnách, ktoré sú odlišné v stupni praženia a spôsobe spracovania. Pomocou významnej techniky povrchovej analýzy – hmotnostnej spektrometrie sekundárnych iónov, sme zaznamenali spektrá rôzne pražených zŕn z bratislavskej pražiarne a suchých fragmentov instantnej kávy komerčnej značky. Zamerali sme sa na charakteristické píky akrylamidu, ktoré sme identifikovali v suchých fragmentoch instantnej kávy a v praženom zrne. Píky akrylamidu v instantnej káve mali rádovo vyššiu intenzitu v porovnaní s intenzitou píku pri praženom kávovom zrne. Potvrdilo sa nám, že proces praženia výrazne ovplyvňuje množstvo akrylamidu v kávových zrnách. Keď sa zrná pražia dlhšie a pomalšie, dochádza k zníženiu

množstva akrylamidu. Naopak, v spektrách rýchlo a prudko praženej instantnej kávy boli píky akrylamidu jasne viditeľné a mali väčšiu intenzitu.

Kľúčové slová: káva; praženie kávy; akrylamid; Maillardova reakcia; hmotnostná spektrometria sekundárnych iónov; hmotnostné spektrá

2Po05

SPECTROSCOPIC AND THEORETICAL STUDIES OF ANTI-SYN ISOMERIZATION ACROSS THE –N=N= BOND

Michal Hricovíni¹, James Asher² and Miloš Hricovíni^{1,*}

¹*Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovak Republic;* ²*Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, Slovak Republic.*

The effect of UV/vis radiation on molecular structures has been widely studied as this phenomenon plays an important role in a number of chemical and biological processes [1]. The isomerization from the energetically more favourable anti-isomer to the syn-isomer by UV/vis excitation has been found to occur in many organic molecules, namely in the systems possessing a double bond systems. These systems tend to undergo an isomerisation process, but then relax back to the more stable isomer by thermal relaxation or when exposed to a particular wavelength of light. The subject of this contribution is the spectroscopic analysis of photochemical processes using NMR spectroscopy, coupled with theoretical DFT method, to properly characterise a series of compounds possessing a quinazolinone moiety to investigate the photochemical behaviour of the –N=N= linkage. The NMR experiments in DMSO solution showed that irradiation at 365 nm leads to photochemically-induced isomerization from the anti- to the higher-energy syn-form around the –N=N= linkage [2]. Theoretical analysis identified possible pathways for syn-anti isomerisation through higher excited states with relaxation through relaxing through π - π^* state [3].

[1] Dugave, C., Demange, L.: *Chem. Rev.*, 103, 2475 (2003).

[2] Michal Hricovíni, Miloš Hricovíni: Photochemically-induced anti-syn isomerization of quinazolinone-derived Schiff's bases: EPR, NMR and DFT analysis. *Tetrahedron* 73, 252 (2017).

[3] Michal Hricovíni, James Asher, Miloš Hricovíni.

Photochemical anti-syn isomerization around the –N=N= bond in heterocyclic imines. *RSC Adv.* 10, 5540 (2020).

2Po06

THE ROLE OF SUBSTITUTION PATTERN ON MOLECULAR STRUCTURE AND NMR PARAMETERS IN GLYCOSAMINOGLYCANS

Michal Hricovíni¹ and Miloš Hricovíni¹

¹*Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, 845 38 Bratislava, Slovakia, Milos.Hricovini@savba.sk*

The knowledge of carbohydrate molecular structure is essential for understanding various processes in glycobiology. Glycosaminoglycans (GAGs), such as heparan sulphate, heparin and chondroitin sulphate, are involved in regulatory processes in the extracellular matrix of higher organisms. Methods of theoretical chemistry, together with high-resolution NMR spectroscopy, essentially contribute to the understanding of GAG's solution properties and formation of their intermolecular complexes with proteins. In the present contribution, the results of density functional theory (DFT) calculations of molecular geometry and indirect proton–proton and proton-carbon coupling constants are discussed and compared with experimental spectroscopic data. The data showed that the positions of sulphate groups at the pyranose rings significantly influenced the molecular structure of investigated GAGs and, consequently, the magnitudes of indirect spin-spin coupling constants. The computed data also revealed that formation of a complex hydrogen bond network and strong ionic interactions influence the first hydration shell and play an important role in shaping the 3D saccharide molecules.

2Po07

PLNE OPTICKÝ THz SENZOR PRE DETEKCIU PRIEMYSELNÝCH TOXICKÝCH LÁTOK

Dusan Lorenc¹, Eva Noskovicova^{1,2}, Justina Novakova², Monika Jerigova^{1,2}, Dusan Velic^{1,2}

¹Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 84104 Bratislava

²Prírodovedecká fakulta UK, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, dusan.lorenc@gmail.com

Toxické chemické látky (TIC/TIM) sú jedným zo súčasných zdravotných, bezpečnostných a environmentálnych rizík a preto ich detekcia patrí k aktuálnym trendom v oblasti senzoričky [1]. Predkladáme teoretický návrh senzora TIC/TIM na báze THz-FWM v plastových fotonických vláknach. Analyt prechádza vonkajšími kanálkami fotonickej štruktúry, kde je zmiešaný s THz poľom a výsledný THz signál je vďaka procesu THz-FWM konvertovaný do optickej oblasti a následne detekovaný optickým spektrálnym analyzátorom. Predbežné simulácie pomocou metódy GNLSE dokazujú, že je možné získať detekovateľný signál.

Tento výskum je financovaný zo zdrojov NATO SPS G5795 „GATES.“

[1] Bennett M.: ACS Today's Chemist at Work, 21 (2003).

2Po08

GRAPHENE QUANTUM DOTS DOPED WITH TRANSITION METALS AND THEIR POTENTIAL USE IN HYDROGEN ENERGY

Michal Malček¹, Lukáš Bučinský¹, Maria Natália Dias Soeiro Cordeiro²

¹Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia michal.malcek@stuba.sk
²LAQV@REQUIMTE, Department of Chemistry and Biochemistry, Faculty of Sciences, University of Porto, Rua do Campo Alegre s/n, 4169-007 Porto, Portugal

Hydrogen gas is a promising clean and renewable energy source. However, it is difficult to store the hydrogen gas (H₂) under ambient conditions due to weak interactions among the H₂ molecules. The first crucial step in the storage process of any gas, in this case H₂, is its efficient adsorption on the adsorbent material.

In our previous works we have reported the potential use of Cu-doped and Cu-decorated graphene quantum dots (GQDs, see Fig. 1) as powerful adsorbents of small gas molecules, in particular H₂O, H₂O₂, H₂S, O₂, etc. [1, 2]. The adsorption ability of these systems (Cu-doped and Cu-decorated GQDs) towards H₂ molecules has been studied in a similar way [3]. The DFT calculations have shown that the Cu-doped GQD is able to bind three H₂ molecules on one dopant (Cu) atom, while the Cu-decorated GQD is able to bind up to five H₂ molecules on one Cu atom (see Fig. 1). However, the QTAIM analysis of bond critical points show that the interaction between the Cu and adsorbed H₂ molecules in the studied systems is weak and can be considered as a physisorption [3]. Such interaction may not be strong enough for efficient H₂ adsorption and its subsequent storage.

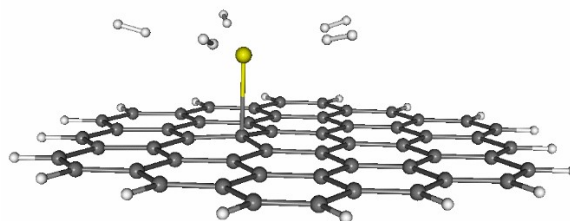


Fig. 1 Scheme of Cu-decorated GQD plus five interacting H₂ molecules.

With this respect, we have recently turned our attention on the differently modified GQDs. The H₂ adsorption performance of different transition metal atoms used as dopants, as well as additional computational protocols are studied in detail.

We are grateful to the Slovak Grant Agencies APVV (contract No. APVV-19-0087 and APVV-20-0213), VEGA (contracts No. 1/0139/20 and 1/0078/21) and SIVVP project (ITMS code 26230120002).

- [1] Malček, M., Cordeiro, M.N.D.S.: *Phys. E.* 95, 59 (2018).
- [2] Malček, M., Bučinský, L., Teixeira, F., Cordeiro, M.N.D.S.: *Phys. Chem. Chem. Phys.* 20, 16021 (2018).
- [3] Malček, M., Bučinský, L.: *Theor. Chem. Acc.* 139, 167 (2020).

2Po09**POST-IONIZÁCIA METEORITOV V TOF SIMS HMOTNOSTNOM SPEKTROMETRI**

Eva Noskovičová^{1,2}, Justína Nováková¹, Vojto Szöcs², Eduard Jáné³, Dušan Lorenc^{1,2}, Monika Jerigová^{1,2}, Dušan Velič^{1,2}

¹*Prírodovedecká fakulta University Komenského, Ilkovičova 6, Bratislava, noskovic.eva@gmail.com*

²*Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, Bratislava*

³*Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta, Bratislava*

Post-ionizačný signál sekundárnych iónov pre železný meteorit Nantan, kamenný meteorit Košice, kamenno-železný meteorit NWA1245 a NWA869 a železný meteorit Sichte Alin bol nameraný v ToF SIMS hmotnostnom spektrometri. Ako zdroj post-ionizačného žiarenia bol použitý femtosekundový laserový systém Cr:Fosterite. Závislosti post-ionizačného SIMS signálu od času (doby letu sekundárnych iónov v detekčnej kolóne) boli kalibrované pomocou troch vybraných píkov na hmotnostné spektra. Hlavnou zložkou meteoritu Košice sú kremičitany a rovnako je tomu v prípade meteoritu NWA1242, ktorý vo väčšom množstve obsahuje aj Cu a K. Meteorit NWA869 obsahuje hlavne Na, Mg, Si a K. Železné meteority Nantan a Sichte Alin sú z podstatnej časti tvorené kovovými prvkami ako je Fe a Ni.

Post-ionizačný SIMS signál bol optimalizovaný zmenou rôznych parametrov, ako napríklad vzájomnou pozíciou vzorky s laserovým zväzkom a ohniskovou vzdialenosťou optickej šošovky umiestnenej v dráhe laserového zväzku pred post-ionizovanou vzorkou.

Pre post-ionizačné SIMS závislosti vybraných meteoritov bola vykonaná PCA (analýza hlavných komponentov) a metóda CNN (konvolučnej neurálnej siete). PCA metódou boli namerané závislosti rozdelené na viacero komponentov a rôzne triedy meteoritov sú tak vzájomne porovnávané na základe amplitúd signálu jednotlivých pík. Pomocou CNN vieme odhadnúť, do ktorej triedy môže patriť meteorit s neznámym zložením na základe nami vytvorenej databázy.

Táto práca vznikla za podpory grantovej agentúry ESA, Contract No. 4000126501/19/NL/SC

[1] Lorenc D., Jane E., Stupavska M., Jerigova M., Velič, D.: *J. Am. Soc. Mass. Spectrom.* 23, 1266 (2012).

2Po10**STUDIUM KATALYTICKÉ AKTIVITY NANOČÁSTIC PLATINY**

Miroslav Orság¹, Libor Kvítek¹, Robert Pucek¹, Aleš Panáček¹

¹*RCPTM a Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, 17. listopadu 12, 77146 Olomouc*

Platinové kovy jsou známy jako excelentní katalyzátory pro řadu chemických reakcí důležitých pro průmyslové aplikace. V nanoměřítku je ovšem jejich katalytická aktivita několikanásobně vyšší a představuje pro nás možnost jak zvýšit využitelnost katalyzátorů v praxi, a to zvýšením katalytické aktivity v souvislosti se zvýšením specifického povrchu a současně se snížením množství drahých kovů pro efektivní katalýzu.

Prezentovaná studie je zaměřena na porovnání katalytické aktivity nanočástic platiny o různých velikostech. Použita byla jedna z nejpoužívanějších modelových reakcí – redukce 4-nitrofenolu tetrahydridoboritanem sodným. Jako základní metoda přípravy nanočástic byla zvolena polyolová metoda (redukce v ethylenglykolu za přítomnosti hydroxidu sodného)¹. Poté bylo metodou postupného přidávání roztoku platičité soli o různých koncentracích dosaženo 4 velikostí částic v rozsahu velikostí 2-4 nm, které byly dále testovány na katalytickou aktivitu. Maximum katalytické aktivity bylo nalezeno pro částice o velikosti cca 3 nm.

Autoři děkují za finanční podporu vnitřního grantu UP Olomouc, projekt IGA_PrF_2021_032.

[1] Quinson, J. *et al.* Investigating Particle Size Effects in Catalysis by Applying a Size-Controlled and Surfactant-Free Synthesis of Colloidal Nanoparticles in Alkaline Ethylene Glycol: Case Study of the Oxygen Reduction Reaction on Pt. *ACS Catal.* 8, 6627–6635 (2018).

2Po11**MALDI-TOF/TOF ANALÝZA SACHARIDOVÝCH ZLOŽIEK LIPOPOLYSACHARIDU Z BAKTÉRIE VIBRIO CHOLERAE O139**

Filip Pančík¹, Zuzana Pakanová¹, Jana Mečárová¹, Alžbeta Čížová¹, Slavomír Bystrický¹, Stanislav Kozmon¹, Peter Baráth¹

¹*Chemický ústav SAV, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, chemfilp@savba.sk*

Aj napriek vedeckému pokroku je cholera pretrvávajúcím problémom predovšetkým

v chudobných krajinách s nedostatkom pitnej vody. Každoročne pribudne 3 až 5 miliónov prípadov tohto ochorenia, pričom 100 000 až 120 000 z nich končí fatálne [1].

Cholera je spôsobená baktériou *Vibrio cholerae*, pričom pandemickú cholera spôsobujú séro skupiny O1 a O139. Snaha o vytvorenie nových vakcín proti *V. cholerae* O139 z bakteriálnych zdrojov, ako sú lipopolysacharidy, je stále mimoriadne dôležitá. Lipopolysacharidy pozostávajú z lipidovej časti, O-špecificky viazaného polysacharidu (OSP) a tzv. jadra (z ang. *core* - *c*) [2].

V tejto práci sme sa zamerali na analýzu vzoriek jadra a OSP (OSPc) z *V. cholerae* O139 s využitím metód MALDI-TOF a MALDI-TOF/TOF. Metódou MALDI-TOF boli identifikované signály OSPc štruktúrnych foriem s jednou alebo dvoma kolitózovými jednotkami, ktoré sú popísané aj v literatúre [3]. Pre získanie viacerých informácií o týchto štruktúrach sme vykonali aj MALDI-TOF/TOF analýzu im prislúchajúcich signálov. Výsledky týchto analýz nám umožnili lepšie pochopiť proces fragmentácie jednotlivých štruktúrnych foriem OSPc.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja – projekt č. APVV-18-0336. Táto práca bola podporovaná Ministerstvom zdravotníctva Slovenskej republiky v rámci projektu s registračným číslom 2019/7-CHÚSAV-4. Táto publikácia vznikla s podporou Operačného programu Integrovaná infraštruktúra pre projekt Štúdia štruktúrnych zmien komplexných glykokonjugátov v procese dedičných metabolických a civilizačných chorôb, ITMS: 313021Y920, spolufinancovaný z Európskeho fondu regionálneho rozvoja. Práca bola podporená projektom VEGA 2/0137/20.

- [1] ALI, M., NELSON, A.R., LOPEZ, A.L., SACK, D.A., *PLoS Negl Trop Dis*, 9 (6), (2015)
 [2] LU, X., PFISTER, H.B., SOLIMAN, S.E., KOVÁČ, P., *Eur J Org Chem*, 2018 (23), (2018)
 [3] COX, A. D., PERRY, M. D., *Carbohydr Res*, 290 (1), (1996)

2Po12 REDOX BEHAVIOR OF COPPER(II) COMPLEXES WITH THIOSEMICARBAZONES AS POTENTIAL ANTICANCER DRUGS STUDIED BY CYCLIC VOLTAMMETRY AND IN SITU SPECTROELECTROCHEMISTRY

Peter Rapta¹

¹*Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics, Slovak Technical University of Technology, Radlinského 9, 81237 Bratislava, Slovak Republic, peter.rapta@stuba.sk*

It is well accepted that the mode of action of Cu(II) anticancer complexes is related to their ROS(reactive oxygen species)-inducing ability, which is directly linked to their electrochemical activity. Variety of new redox active copper(II) complexes and respective proligands based on thiosemicarbazones were recently studied by in situ EPR and UV-vis spectroelectrochemical experiments. It was shown that the proligands were mostly not redox active within the biologically accessible range. Cyclic voltammograms of investigated copper complexes confirmed their redox activity in the cathodic range. The first reduction peak can be attributed to a Cu(II) → Cu(I) transition. A large peak-to-peak separation suggested the significant structural differences between the Cu(II) and Cu(I) redox states where the electron transfer in Cu(I/II) systems was shown to involve an unusually large change in coordination geometry. The reduction of investigated Cu(II) complexes clearly occurs within the biologically accessible range both in water and in organic solvents. Upon the first reduction step the paramagnetic Cu(II) state is converted into the EPR silent Cu(I) state as confirmed by a strong decrease of the characteristic EPR signal. The redox behavior observed for the first reduction step can be explained by an electrochemical dual-pathway square scheme.

The study was supported by VEGA grant 1/0504/20 and by the Slovak Research and Development Agency for financial support under the contract No. APVV-19-0024.

- [1] Stepanenko I., Babak M. V., Spengler G., Hammerstad M., Popovic-Bijelic A., Shova, S., Büchel E. G., Darvasiová, D., Rapta, P., Arion, V. B.: *Biomolecules* 2021, 11, 862 (2021).
 [2] Milunovic, M., Palamarciuc, O., Sirbu A., Shova, S., Dumitrescu, D., Dvoranová, D., Rapta, P., Petrasheuskaya, T. V., Enyedy, E. A., Spengler, G., Ilic, M., Sitte, H. H., Lubec G., Arion, V. B.:

Biomolecules 2020, 10, 1213 (2020).

- [3] Palamarcuic O., Milunovic, M., Sirbu, A., Stratulat E., Pui A., Gligorijevic N., Radulovic S., Kožišek J., Darvasiová D., Rapta P., Enyedy E. A., Novitchi G., Shova S., Arion V. B.: *New J. Chem.*, 43, 1340 (2019).

2Po13

ŠTÚDIUM MECHANIZMU OXIDÁCIE INZULÍNU NA ELEKTRÓDACH MODIFIKOVANÝCH NANOČASTICAMI OXIDU NIKELNATÉHO

Katarína Sisáková¹, Ivana Šišoláková¹, Jana Shepa¹, Renáta Oriňaková¹

¹*Prírodovedecká fakulta Univerzity Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, Moyzešova 11, 040 01 Košice, ivana.sisolakova@upjs.sk*

Nanočastice oxidu nikelnatého (NiONPs) predstavujú jedného z najvhodnejších kandidátov pre modifikáciu povrchu elektród pre elektrochemickú detekciu inzulínu. Tento fakt vyplýva z ich katalytickej aktivity voči oxidácii inzulínu z dôvodu tvorby NiOOH[•] častice v alkalickom prostredí. Napriek tomu, že je známy mechanizmus oxidácie inzulínu na NiO modifikovaných elektródach je nevyhnutné lepšie preskúmať a pochopiť mechanizmus oxidácie inzulínu na elektródach modifikovaných pomocou NiONPs. Tento výskum by mal zabezpečiť posun vo vývoji elektrochemického senzora pre elektrochemickú detekciu inzulínu ako nový prístup diagnostiky diabetu [1].

Elektrochemický senzor bol pripravený modifikáciou uhlíkovej tlačenej elektródy pomocou uhlíkových nanotrubičiek, chitozánu a NiONPs. Morfológia povrchu pripravených elektród bola študovaná pomocou skenovacieho elektrónového mikroskopu s EDX analýzou povrchu. Mechanizmus elektrochemickej reakcie a kinetické parametre boli stanovené použitím metódy cyklickej voltamétrie a elektrochemickej impedančnej spektroskopie. Pripravený senzor disponoval nízkym limitom detekcie 19,6 nM, vysokou citlivosťou 7,06 $\mu\text{A}/\mu\text{M}$ a širokým lineárnym rozsahom 600 nM – 10 μM . Na základe uvedených charakteristík môžeme tvrdiť, že pripravený senzor je vhodný na elektrochemickú detekciu inzulínu.

Táto práca vznikla za podpory projektu Vyšehradského fondu číslo 22020140 a projektu APVV-PP-COVID-20-0036.

- [1] Šišoláková I., Hovancová J., Oriňaková R., Oriňak A., Garcia D., Shylenko O., Radoňák J.:

Electroanalysis. 31, 1 (2018).

2Po14

TOXICITY AND BIODISTRIBUTION OF NANOPARTICLES

Peter Šimon, Tibor Dubaj, Zuzana Cibulková

Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia; e-mail: peter.simon@stuba.sk

Nanoparticles (NPs), that are characterized by the size range of up to 100 nm, may be toxic even though the corresponding bulk material can be safe. The first reason for the toxicity of nanoparticles is their dimension – they are so small that they easily enter the body through the alveolas in the lungs when inhaled, through pores in the gut when ingested or through the pores in the skin. Due to their small dimension, NPs can enter such parts of the body where the counterpart bulk materials cannot occur. If the nanomaterials are biopersistent, they can accumulate in various organs. The second reason for their toxicity is their great surface energy due to unsatisfied chemical bonds at their surface which brings about their strong interaction with the surrounding biological matrix [1].

Within the project HISENTS, the sensor platform for nanotoxicity has been developed [2]. Toxicity of nanoparticles is related to their concentration in the organ under consideration and time of exposure. Both, the concentration and exposure time, can be estimated from physiologically based pharmacokinetic (PBPK) modelling. The PBPK model enables to describe the ADME (absorption, distribution, metabolism, excretion) process and, hence, to predict the concentration of NPs in the organs and time of exposure. Application of the PBPK model is demonstrated on the treatment of in vivo distribution of PEGylated nanoparticles in rats [3].

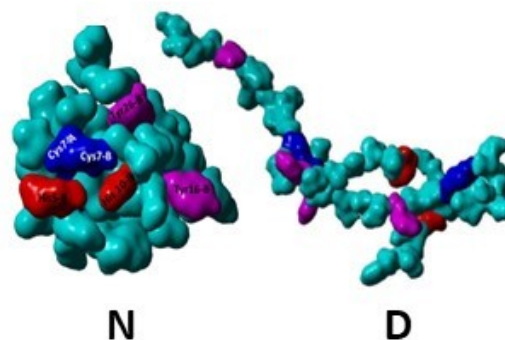
Acknowledgement: This work is financed by the project No. H2020-NMP-685817 High level Integrated Sensor for NanoToxicity Screening (HISENTS).

- [1] Šimon P., Joner E., *J. Food Nutr. Res.* 47, 51 (2008)
 [2] Kohl Y., et al., *Small* 2006012 (2021)
 [3] Kozics K. et al., *Nanomaterials* 11 1702(2021).

2Po15**ROLE DENATURACE/RENATURACE VE STRUKTUŘE INZULINU**Iveta Trísková¹, Nikola Nosková¹, Libuše Trnková¹¹Masarykova univerzita, Přírodovědecká fakulta, Ústav chemie, Kamenice 5, 625 00 Brno, 175126@mail.muni.cz

Inzulín, polypeptidický hormon produkovaný Langerhansovými ostrůvky slinivky břišní, je nezbytným regulátorem krevního cukru všech savců. Nedostatek inzulínu je doprovázen zvýšenou hladinou cukru v krvi a eventuálně i diabetem. Molekula inzulínu je tvořena dvěma polypeptidickými řetězci, a to A řetězcem (21 aminokyselin) a B řetězcem (30 aminokyselin) vzájemně spojenými disulfidickými můstky [1]. Jelikož je inzulín jedním z nejlépe charakterizovaných a nejpoužívanějších proteinů v terapii diabetu, znalost stability tohoto proteinu je velmi důležitá z hlediska vztahu struktury a funkce a jeho chování v organismu [1]. Konformační stabilita inzulínu byla již dříve intenzivně studována především z hlediska vlivu pH, koncentrace solí nebo přítomnosti různých organických látek, a strukturální změny mezi nativní a denaturovanou formou se odrážely především ve spektrech cirkulárního dichroismu (CD) [1,2].

Naše práce se zaměřila na sledování strukturálních změn molekuly inzulínu v důsledku termální denaturace. K tomuto účelu bylo využito nejen CD spektrálního přístupu, ale i přístupu elektrochemického, neboť se ukázalo, že i voltametrie inzulínu provedená na různých typech tištěných grafitových elektrod velmi dobře odráží rozdíl mezi jeho nativní a denaturovanou formou. Kinetika denaturace/renaturace byla sledována v různých časových intervalech a na základě získaných experimentálních dat bylo predikováno zastoupení α -helixů, β -skládaných listů a náhodných klubek v sekundární struktuře molekuly inzulínu.



Obr. 1 Model nativní a denaturované formy inzulínu vytvořený programem YASARA (Yet Another Scientific Artificial Reality Application) [3].

Výzkum byl finančně podporován projektem MUNI/A/1192/2020 (MŠMT ČR) a projektem the International Visegrad Fund (22020140). Autoři taktéž děkují Dr. Tadeje Janc z CEITEC MU za pomoc při modelování struktur inzulínu v programu YASARA.

- [1] Jiang C., Chang J.-Y.: *FEBS Letters*. 579, 3927 (2005).
 [2] Brems D. N., Brown P. L.: *Biochemistry*. 29, 9289 (1990).
 [3] Krieger E., Vriend G.: *J. Comput. Chem.* 36, 996 (2015).

2Po16**THE CHARACTERISATION OF EPOXIDES WITH FLAME RETARDANTS BY TESTING OF FLAMMABILITY**Anna Vykydalová¹, Jozef Rychlý¹, Edita Matysová², Zdenko Špitálsky¹¹ Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, Slovakia, anna.vykydalova@savba.sk² SYNPO, a.s., S. K. Neumannna 1316, 532 07 Pardubice, Czech Republic

Epoxide is known as a cyclic ether with a three-atom ring. Because of that ring which is approximates equilateral triangle, the epoxide is highly reactive ether. They are used in a large scale for many applications, for example in the manufacture of adhesives, coatings, plastics, primers and sealers and other products and materials used in building and construction applications [1].

In this study we focus on improvement of thermal and flame retardant properties of epoxy carbon laminates and so extend the possibilities of their applications, especially in the transport industry (aviation, automotive, train production) and possibly construction industry. In general, it is known that the flame retardants involve a diverse

group of chemicals which are added or modify the manufactured material. Their role in the material is to prevent or slow down the further development of ignition by means of various physical and chemical effects [2]. The examination of burning of samples of pure epoxy and epoxy with new kind of flame retardants (less toxicity or aggressivity to the environment) were performed by cone calorimeter.

Acknowledgements:

This research was supported by the project MERF: in a framework of M-ERA.NET.

- [1] Siel G., Rieth R, Rowbottom K.T.: *Epoxides*. Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, (2000).
 [2] Hollingbery L.A., Hull T.R: *Thermochimica Acta*. 509, 1-11 (2010).

2Po17

RUTHENIUM-NITROSYL COMPLEXES WITH DIMETHYL-1H-PYRAZOLE LIGANDS: INSIGHTS INTO THE REDOX CHEMISTRY AND VIS LIGHT-INDUCED NO RELEASE

Michal Zalibera¹, Samuel Cahký¹, Iryna Stepanenko², Vladimir B. Arion²

¹Slovak University of Technology, Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics, Radlinského 9, SK-81237 Bratislava, Slovakia

²Institute of Inorganic Chemistry, Faculty of Chemistry, University of Vienna, Währinger Strasse 42, A-1090 Vienna, Austria
 michal.zalibera@stuba.sk

The last decade has brought significant progress in the studies of the biological effects of NO. High NO concentrations have been found to induce apoptosis of tumour cells. Ruthenium nitrosyl complexes represent candidates for the development of a new generation of anticancer drugs. Their action relies on the photo-induced NO release that stimulates the apoptosis of tumour cells. The presented study examined the redox and photochemical properties of the *trans*-[RuCl(3,5-diMe-1H-pz)₄NO]Cl₂ complex. The compound is redox-active and undergoes two single-electron reductions centred at the nitrosyl ligand. The second electron transfer induces a rapid follow-up chemical reaction. The EPR of [RuCl(3,5-diMe-1H-pz)₄NO]⁺ cation confirmed its paramagnetic character with the expected {Ru(NO)}⁷ electron structure and suggest on several isomers differing in the orientation of the NO[•] group. The parent dication [RuCl(3,5-diMe-1H-pz)₄NO]²⁺ releases NO[•] upon irradiation with

visible green light, paralleled by the coordination of a solvent molecule. However, the preliminary data indicate that the process is not very efficient. This is mainly caused by the low absorption in the visible range of the electromagnetic spectrum. The direct application of the studied complex in phototherapeutic praxis is thus not expected. Nevertheless, the discovered Vis photoactivity represents a solid starting point for future optimization of tetra-azole-Ru-nitrosyls.

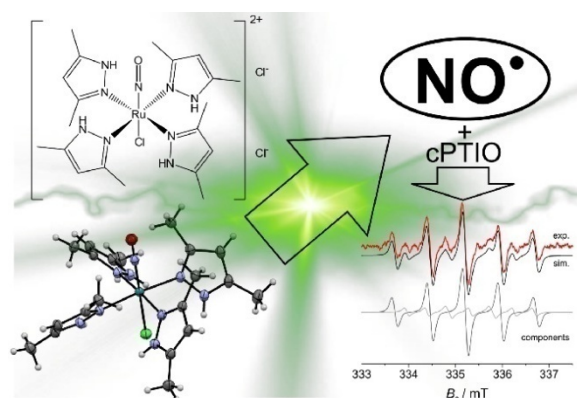


Fig. 1 Green light-induced NO[•] release evidenced by EPR detection with cPTIO nitronyl nitroxide

We acknowledge the financial support of the Slovak Research and Development Agency (APVV-19-0024), Slovak Scientific Grant Agency VEGA (1/0078/21).

- [1] Orłowska E. et al.: *Inorg. Chem.* 57, 10702 (2018)
 [2] Singh, P. et al.: *Inorg. Chem.* 47, 7106 (2008)

POSTERY - SEKCIA 3
ANORGANICKÁ A MATERIÁLOVÁ
CHÉMIA

3Po01
SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION
OF COBALT(II) DICARBOXYLATES
PREPARED FROM DISODIUM
MALONATE WITH N-DONOR LIGANDS

Marek Brezovan¹, Ján Moncol¹, Ján Pavlik¹, Eubor Dlháň¹, Peter Segľa¹

¹ Faculty of chemical and food technology STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, marek.brezovan@stuba.sk

Dianionic dicarboxylate ligands have been used not only to conjoin cationic metal nodes in the process providing necessary charge balance to permit formation of a large variety of metal-organic frameworks (MOFs) [1], but carboxylate group can also act as a linker between inorganic moieties [2,3]. By reaction of cobalt (II) salt, disodium salt of malonic acid and imidazole (im) (or 1-*H*-benzimidazole(bzim)) in mixed solvent methanol:water (1:1) were prepared three new coordination polymers of a different composition and molecular structure. Surprisingly were obtained two complexes with oxalate dianion (ox²⁻), namely; [Co(ox)(im)₂]_n (*I*) and [Co(ox)(bzim)₂]_n (*II*) and one with malonic dianion (mal²⁻), [Co(mal)(bzim)₂]_n (*III*). Obtained coordination polymers were characterized by elemental analysis, IR and electron spectroscopy and X-ray structural analysis. Magnetic properties of some suitable complexes were studied as well. Oxalate dianions in complex *I* and *II* are coordinated in μ_2 - η^2 - η^2 -chelate-bridging manner and mal²⁻ in complex *III* is also observed in μ_3 - η^2 - η^1 - η^1 -chelate-bridging manner.

Financial support was provided by: We thank Slovak Research and Development Agency (APVV-18-0016) and Slovak Grant Agency (VEGA 1/0639/18, KEGA 018STU-4/2020).

- [1] Monterey, M. R.; Krishnan, M. S.; Patel, M. N.; Supkowski, M. R.; LaDuca, L. R.: *Crystal Growth Des.* 7, 1145-1153 (2007).
- [2] Juan, C.; Mareque, R.; Lee, B.: *Coord. Chem. Rev.* 183, 43-80 (1999).
- [3] Rosi, N. L.; Kim, J.; Eddaoudi, M.; Chen, B.; O'Keefe, M.; Yaghi, O. M.: *J. Am. Chem. Soc.* 127, 1504 (2005).

3Po02
ŠTÚDIUM KINETIKY LÚHOVANIA
MECHANICKY AKTIVOVANÉHO
NAUMANITU Ag₂Se

Katarína Gáborová^{1,2}, Marcela Achimovičová¹, Pavel Škácha⁴, María Florencia Márquez-Zavalía^{5,6}, Oľga Šestinová¹

¹Ústav geotechniky, Slovenská akadémia vied, Watsonova 45, 040 01 Košice

²Fakulta materiálov, metalurgie a recyklácie, Technická univerzita v Košiciach, Letná 9, 042 01 Košice

³Hornické muzeum Příbram, Nám. Hynka Kličky 293, 261 01 Příbram VI

⁴Národní muzeum, Václavské nám., 68, 110 00 Praha 1

⁵IANIGLA, CCT-Mendoza (CONICET), Avda. A. Ruiz Leal s/n, Parque San Martín, CC330, 5500 Mendoza

⁶Mineralogía y Petrología, F.A.D., Universidad Nacional de Cuyo, Centro Universitario, 5502 Mendoza, Argentina

Minerál naumanit s chemickým zložením Ag₂Se patrí do významnej skupiny minerálov selénu – selenidov. V minulosti nebola selenidom venovaná veľká pozornosť kvôli ich zriedkavému výskytu v porovnaní so sulfidmi. Relatívna vzácnosť selenidov je spôsobená osobitnými podmienkami ich pôvodu. Napriek ich zriedkavému výskytu, sú rudy selenidov bohaté na vzácne kovy a okrem toho obsahujú pomerne vysoké množstvá Ag vo forme prírodného minerálu Ag₂Se, ktorý je možné spracovať ekologickejšie, t. j. hydrometalurgickým procesom – lúhovaním [1]. Kinetika lúhovania je výrazne ovplyvnená nielen tuhofázovými vlastnosťami minerálu, či heterogenitou štruktúry, ale aj vhodnou predúpravou tuhej fázy – mechanickou aktiváciou, mletím v planetárnom mlyne a vhodnou voľbou lúhovacieho činidla [2]. Práca sa zaoberá štúdiom štruktúry a morfológie naumanitu a možnosťou čo najefektívnejšieho získavania striebra a železa z mechanicky aktivovaného prírodného minerálu naumanitu lúhovaním v prostredí kyseliny dusičnej. Mechanická aktivácia študovaného minerálu, ktorá má za následok zväčšenie špecifického povrchu a zvýšenie teploty lúhovacieho činidla sa výrazne prejavili na výsledkoch výťažnosti striebra a železa. Optimalizáciou podmienok bola dosiahnutá z mechanicky aktivovanej vzorky (30 min) maximálna výťažnosť 96% Ag v 40% HNO₃ pri teplote 50 °C. Pomocou atómovej absorpčnej spektrometrie, röntgenovej práškovej difrakčnej analýzy a optickej a skenovacej elektrónovej mikroskopie bola charakterizovaná štruktúra,

morfológia a chemické zloženie študovaného minerálu naumanitu.

Táto práca bola podporená Vedeckou grantovou agentúrou MŠVVaŠ SR a SAV (projekt č. 2/0103/20 a 2/0165/19).

- [1] Havlík T.: Acta Metallurgica Slovaca 4, 276 (1997).
[2] Achimovičová M: Acta Montanistica Slovaca. 3, 127 (1998).

3Po03

POTENCIONÁLNE BIOLOGICKY ZAUJÍMAVÉ IÓNOVÉ KOMPLEXY ZINKU S NITRODERIVÁTMI 8-HYDROXYCHINOLÍNU

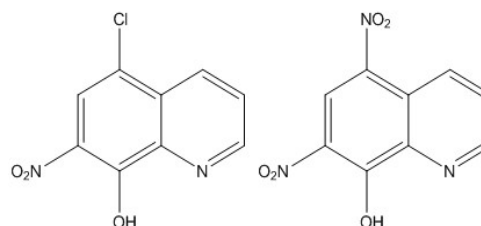
Michaela Harmošová¹, Natália Kuncová¹, Erika Samoľová², Miroslava Litecká³, Ivan Potočňák¹

¹Ústav chemických vied, PF UPJŠ, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovenská republika, ²Fyzikálny ústav AV ČR, Na Slovance 2, 182 21 Praha, Česká republika, ³Ústav anorganickej chémie AV ČR, Husinec-Řež č.p. 1001, 250 68 Řež, Česká republika, michaela.krescankova@student.upjs.sk

Zlúčeniny zinku a komplexy obsahujúce deriváty 8-hydroxychinolínu vykazujú viaceré zaujímavé biologické vlastnosti [1]. Preto sme sa v tejto práci zamerali na prípravu iónových komplexov zinku s nitroderivátmi 8-hydroxychinolínu, konkrétne s HCINQ (5-chlór-7-nitro-8-hydroxychinolín) a s HdNQ (5,7-dinitro-8-hydroxychinolín) zobrazenými na Obr. 1. Boli pripravené štyri nové komplexné zlúčeniny, $K[Zn(CINQ)_3] \cdot 2DMF$ (**1**), $NH_2(CH_3)_2[Zn(CINQ)_3] \cdot DMF$ (**2**), $K[Zn(dNQ)_3]$ (**3**) a $K[Zn(Br)(dNQ)_2] \cdot 1,4$ -dioxán (**4**). Pripravené látky sme charakterizovali IČ spektroskopiou, elementárnou analýzou a monokryštálovou RTG štruktúrnou analýzou.

Látky **1**, **2** a **3** majú analogické štruktúry, v ktorých sa na centrálny atóm zinku viažu chelátovo bidentátne tri molekuly deprotonovaných ligandov CINQ (**1** a **2**) alebo dNQ (**3**). Záporný náboj komplexného aniónu je vyvažovaný draselným (**1**, **3**) alebo dimetyl-amónnym (**2**) kationom. V štruktúrach látok **1** a **2** sú mimo koordinačnej sféry prítomné molekuly DMF. V štruktúre látky **4** sa na centrálny atóm zinku viažu chelátovo bidentátne dve molekuly deprotonovaného ligandu dNQ a monodentátne atóm brómu; záporný náboj aniónu je vyvažovaný draselným kationom a mimo koordinačnej sféry je prítomná molekula 1,4-dioxánu. V budúcnosti chceme pripravené látky

študovať z hľadiska ich cytotoxickej a antimikrobiálnej aktivity.



Obr. 1 Štruktúrny vzorec HCINQ (vľavo) a HdNQ (vpravo)

Táto práca vznikla za podpory projektov VEGA 1/0148/19, APVV-18-0016, VVGS-PF-2020-1425 a VVGS-PF-2021-1772.

- [1] Kuchárová V.: Polyhedron. 170, 447-457 (2019).

3Po04

OBNOVENÍ ANTIBAKTERIÁLNIČH ÚČINKŮ NEAKTIVNÍCH ANTIBIOTIK VŮČI REZISTENTNÍM BAKTERIÍMPO KOMBINACI S KYANOGRAFEN/STRĚBRNÝM NANOHYBRIDEM

Lucie Hochvaldova¹, Renáta Večeřová¹, Milan Kolář¹, Libor Kvítek¹, Aleš Panáček¹

¹Katedra Fyzikální chemie, Univerzita Palackého Olomouc, Přírodovědecká fakulta, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, Česká Republika, lucie.hochvaldova@upol.cz

²Katedra Mikrobiologie, Univerzita Palackého Olomouc, Lékařská fakulta, Hněvotínská 5, 775 15 Olomouc, Česká republika

Množství bakteriálních kmenů rezistentních vůči antibiotikům se každoročně navyšuje mimo jiné v důsledku nadměrného a nevhodného používání antibiotik, což vede ke ztrátě jejich účinnosti. Jedním ze způsobů, jak lze překonat bakteriální rezistenci, je kombinovaná terapie za použití antibiotik v kombinaci s různými antimikrobiálními látkami, jako jsou mimo jiné nanostrukturované anorganické materiály, které v současné době představují slibnou skupinu antibakteriálních látek zkoumaných z hlediska jejich synergického účinku s konvenčními antibiotiky. V rámci této studie byl představen velmi účinný způsob pro zvýšení a obnovení antibakteriální aktivity neaktivních antibiotik prostřednictvím jejich kombinace s kyanografen/Agnanohybridem (GCN/Ag). Nanohybrid byl syntetizován chemickou redukcí prekurzorového materiálu, kde byly kationty

stříbra koordinálně navázány na list kyanografenu. Navýšení antibakteriální aktivity bylo hodnoceno pomocí frakční inhibiční koncentrace (FIC) u řady antibiotik mající různý mechanismus účinku (gentamicin, ceftazidim, ciprofloxacín, kolistin) na bakteriích mající odlišné mechanismy rezistence. Synergické a částečné synergické účinky byly prokázány pro všechna antibiotika proti všem rezistentním kmenům s výjimkou ciprofloxacínu, jež vykazoval pouze aditivní účinek. Kromě toho bylo zjištěno, že mechanismus účinku antibiotik i mechanismus bakteriální rezistence silně ovlivňují konečný účinek společného antibakteriálního působení testovaných látek.

Autoři děkují za finanční podporu projektu Grantové Agentury České republiky (projekt 19-22720S) a vnitřnímu grantu UP Olomouc projekt IGA_PrF_2021_028.

3Po05

ROZKLAD CHLOROVANÝCH UHLOVODÍKŮ TECHNOLOGIÍ MSO

Vojtěch Galek¹, Anna Černá¹, Petr Pražák¹, Jan Hadrava¹, Jan Horníček², Libor Mastný²

¹Centrum výzkumu Řež s r.o., Husinec-Řež 130, 250 68 Řež, Vojtech.galek@cvrez.cz

²Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 1905/5, 166 28 Praha 6, Libor.Mastny@vscht.cz

Halogenované uhlovodíky patří do skupiny látek, pro jejichž obsah jsou stanoveny koncentrační limity pro odpadní vody, odpady, ovzduší. Nárůst průmyslového využívání těchto látek vede k vysoké zátěži životního prostředí. Z tohoto důvodu je nutné tyto látky efektivně likvidovat. Při spalování halogenovaných organických látek mohou v případě absence efektivního systému čištění spalin unikat do ovzduší jiná, mnohdy nebezpečnější rezidua vznikající při rozkladu.

Alternativu ke konvenčním metodám likvidace halogenovaných uhlovodíků představuje Technologie MSO (Molten Salt Oxidation), při které jsou předmětné látky zaváděny spolu s oxidovadlem (vzduch) pod hladinu taveniny alkalického uhlíkatanu. Při vysoké teplotě (cca 1000 °C) je organický uhlík zoxidován v ideálním případě až na oxid uhličitý. Konečným produktem odstranění halogenu je alkalický halogenid.

Cílem práce bylo na rozkladu tetrachlorethylenu ověřit funkčnost dvoureaktorové laboratorní aparatury a monitorovat vznikající produkty rozkladu chlorovaného uhlovodíku. V průběhu

rozkladu byl v odplyně detekován vysoký obsah oxidu uhelnatého. Účinnost zachytu chloru zreagovaného na chlorid se pohybovala okolo 70 % v závislosti na dávkování vstupních reagentů.

Získané výsledky potvrdily možnost reálné cesty likvidace nebezpečných halogenovaných uhlovodíků uvedeným postupem. Další práce bude zaměřena na monitoring optimálního řízení celého procesu s možností detekce případných dalších vedlejších produktů.

Poděkování: Projekt podporovaný TA ČR č. TN01000007 v rámci Programu Národní centra kompetence - 1. VS

3Po06

TOXICITA PEDOT: PSS MATERIÁLŮ

Šárka Hradilová¹, Kateřina Poláková¹, Sepil Tekoglu²

¹Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů Czech Advanced Technology and Research Institute (CATRIN), Universita Palackého Olomouc, Šlechtitelů 27, 779 00 Olomouc, Česká republika, sarka.hradilova@upol.cz

²Linz Institute for Solar Cells (LIOS), Johannes Kepler University Linz, Linz, Austria

Použití organických polovodičů při konstrukci bioelektronických zařízení představuje velmi nadějnou alternativu ke kovovým elektrodo- vým systémům a tradičním anorganickým polovodičům. Pro tato zařízení je biokompatibilita rozhraní mezi elektronickým prvkem a živými buňkami kritickým parametrem. Poly (3,4-ethylendioxythiofen): poly (styrensulfonyl) (PEDOT: PSS) je z hlediska praktické aplikace zřejmě nejúspěšnějším vodivým polymerem. Má mnoho jedinečných vlastností, jako je vynikající optická průhlednost v rozsahu viditelného světla, vysoká elektrická vodivost, a dobrá fyzikální a chemická stabilita na vzduchu. Otázka dlouhodobé biokompatibility PEDOT: PSS ovšem není zcela vyřešena. Proto se hledají stále nové postupy, jak biokompatibilitu vylepšit. Slibně se jeví např. biofunkcionalizace pomocí DNA.

V naší studii jsem sledovali a porovnávali toxicitu PEDOT:PSS a PEDOT:DNA filmů nanosených na skleněném nosiči na buněčné linii NIH3T3 myších fibroblastů. Zaměřili jsme se na morfolo- gické změny buněk po kontaktu s filmem pozorovatelné v mikroskopu i na vlastní viabilitu stanovenou pomocí měření metabolické aktivity buněk MTT testem, tak i na pomocí live/dead viability kit s fluorescenčním značením na cytometru. Získaná data ukazují, že spojení

PEDOT:DNA predstavuje nadějnu cestu, jak zachovat výhody polymeru a současně zvýšit biokompatibilitu vůči živým buňkám.

Tato práce vznikla za finanční podpory projektu: ERDF project “Development of pre-applied research in nanotechnology and biotechnology” (No. CZ.02.1.01/0.0/0.0/17_048/0007323) a EnzymBiokat – EFRE project (GZ2018-98279-2)

3Po07 EXPERIMENTÁLNÍ MOŽNOSTI STUDIA SOL-GEL POLYKONDENZACE RESORCINOLU S FORMALDEHYDEM

Eva Kinnertová, Václav Slovák, Roman Maršálek, Martin Mucha

Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava, eva.kinnertova@osu.cz

Cílem příspěvku je demonstrovat možnosti obvyklých (DLS, FTIR) i méně obvyklých (DSC, low-field NMR) technik pro sledování sol-gel polykondenzace resorcinolu (R) s formaldehydem (F).

Byly zkoumány tři zásaditě katalyzované ($C = Na_2CO_3$) polykondenzační směsi s různou koncentrací katalyzátoru ($R/C = 25$ a 50) a hmotnostním obsahem výchozích látek (20 a 40%). Malé množství směsi ($10\ \mu l - 1\ ml$) bylo ihned po smíchání kontinuálně analyzováno při $40\ ^\circ C$ pomocí DSC, NMR relaxometrie a DLS a diskontinuálně pomocí FTIR. RF polykondenzace je dvoukroková exotermní reakce (vznik substituovaných hydroxymethyl derivátů resorcinolu, následován spojováním do 3D sítě – gelu). Růst velikosti částic a jejich následnou agregaci v průběhu reakce lze pozorovat pomocí DLS. K nalezení změn funkčních skupin v různých časech reakce je vhodná FTIR analýza. DSC umožňuje získat kinetickou rovnici reakce včetně jejího modelování a také sledování skelného přechodu postupně vznikající polymerní matrice. NMR relaxometrie poskytuje ze závislosti amplitudy relaxačních časů jader vodíku na době reakce informace o různých typech vody v reakční soustavě (voda v pórech polymeru nebo voda mimo porézní systém).

Mechanismus RF polykondenzace není doposud zcela vysvětlen a kombinace uvedených technik by mohla vést k objasnění nejen mechanismu a kinetiky reakce, ale i identifikaci faktorů ovlivňujících vlastnosti vznikajícího gelu.

3Po08 POST-SYNTETICKÁ MODIFIKÁCIA MICROPÓROVITÉJ METAL- PORFYRINÁTOVEJ SIETE PRE ADSORPCIU PLYNOV

Nikolas Király¹, Miroslav Almáši¹, Vera Meynen², Vladimír Zelenák¹

¹*Katedra anorganickej chémie, Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta UPJŠ, Moyzesová 11, 041 54 Košice. nikolas.kiraly@student.upjs.sk*

²*Oddelenie chémie, Laboratórium adsorpcie a katalýzy LADCA, Univerzita v Antverpách, B-2610 Belgicko*

V oblasti kryštalických poréznych materiálov vykazujú zlúčeniny typu Metal-organic frameworks (MOF), široké spektrum chemických a fyzikálnych vlastností, vďaka možnej ladiateľnosti stavebných zložiek, povrchu a veľkosti pórov [1]. Z tohto dôvodu sa materiály typu MOF skúmajú v aplikáciách, ako sú skladovanie a separácia plynov, katalýza alebo v energetickom priemysle ako matrica v Li-S batériách [2]. Pri našej ceste za objavom nových pórovitých štruktúr s multifunkčnými linkerami sme sa zamerali na porfyrínové stavebné bloky, pretože väčšinu 3d-prvkov je možné vložiť do štruktúry materiálu bez zmeny topológie siete. Takto je možné zaviesť vhodnú funkcionalizáciu pomocou post-syntetických modifikácií [3].

4-tetrakarboxyfenylporfyrín (H_6TCPP) je najintenzívnejšie skúmaným linkerom pre syntézu MOF na báze porfyrínu. Uvádzame syntézu a charakterizáciu MOF materiálu na báze porfyrínu a iónov gália(III), t.j. GaTCPP s chemickým zložením $[Ga_2(H_2TCPP)(OH)_2] \cdot 3DMF \cdot 3H_2O$ (DMF - *N,N'*-dimetylformamid), ktorý bol pripravený hydrotermálnou syntézou a charakterizovaný pomocou širokej škály analytických techník: infračervená spektroskopia, termogravimetrické merania, elementárna analýza a analýza monokryštálovej štruktúry (SXRD). Ďalším krokom nášho skúmania bol proces modifikácie koordinačného polyméru jeho namáčaním v roztokoch iónov Ni^{2+} a Co^{2+} v DMSO. Aktivované porézne komplexy sa podrobili adsorpčným meraniam Ar pri $87\ K$. V závislosti od prítomnosti iónu v štruktúre sme pozorovali rozdielne hodnoty BET povrchu. Detailné informácie o dosiahnutých výsledkoch budú odprezentované formou postera.

Práca bola finančne podporená grantovou agentúrou VEGA projektom pod číslom 1/0865/21 a vnútorným vedeckým grantovým systémom UPJŠ pod číslom vvgS-2020-1667.

- [1] Furukawa, H.; Cordova, K. E.; O’Keeffe, M.; Yaghi, O. M. *Science*, 2013, 341, 1230444.
 [2] Zhou, H.-C.; Long, J. R.; Yaghi, O. M. *Chem. Rev.* 2012, 112, 673–674.
 [3] Gao, W.-Y.; Chrzanowski, M.; Ma, S. *Chem. Soc. Rev.* 2014, 43, 5841–5866.

3Po09**VLIV POVRCHOVÉ CHEMIE NA MNOŽSTVÍ NEMRZNOUCÍ VODY V PORÉZNÍM UHLÍKU**Lucie Kořená¹, Irene Lamata¹¹*Ostravská univerzita, Katedra chemie, 30. dubna 22, Ostrava 70103, korena2@seznam.cz*

V rámci této práce byl sledován vliv povrchové chemie uhlíkatých materiálů na množství nemrznoucí vody v jejich pórech pomocí DSC termoporometrie (TPM). Byly připraveny dva porézní uhlíkaté materiály podle [1], respektive [2]. Tyto materiály byly následně oxidovány třemi způsoby (oxidace persíranem amonným a kyselinou sírovou; oxidace kyselinou fosforečnou a Fentonova oxidace) lišícími se intenzitou oxidace, čímž byla zajištěna rozdílná povrchová chemie jednotlivých vzorků (potvrzeno pomocí Boehmovy titrace). Na základě výsledků TPM měření bylo zjištěno, že množství nemrznoucí vody je v případě neoxidovaných vzorků nižší než v případě vzorků oxidovaných. Bylo tedy potvrzeno, že povrchová chemie skutečně ovlivňuje množství nemrznoucí vody v pórech. Předpoklad, že s rostoucí intenzitou oxidace poroste i množství nemrznoucí vody, však na základě provedených měření nebyl potvrzen.

Tato práce vznikla za podpory projektu SGS08/PřF/2021.

- [1] Bulavová P., Parmentier J., Slovák V.: *Microporous Mesoporous Mater.* 272, 155 (2018).
 [2] Liang C., Dai S.: *J. Am. Chem. Soc.* 128, 5316–5317 (2006).

3Po10**HETEROLEPTIC Ni(II) COMPLEX WITH ENHANCED ZERO-FIELD SPLITTING PARAMETER**Lenka Krešáková¹, Mariia Holub², Alvaro Werner^{1,3}, Erik Čižmár², Larry R. Falvello³, Juraj Černák¹¹*Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Sciences, P. J. Šafárik University in Košice, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovakia*²*Institute of Physics, Faculty of Science, P. J. Šafárik University in Košice, Park Angelinum 9, 041 54 Košice, Slovakia*³*Instituto de Nanociencia y Materiales de Aragón (INMA), Departamento de Química Inorgánica, CSIC-University of Zaragoza, Pedro Cerbuna 12, E-50009 Zaragoza, Spain*

Correspondence e-mail:

lenka.kresakova@student.upjs.sk

Single-ion anisotropy of the Ni(II) central atom, D (including the rhombic term E) in hexacoordinated Ni(II) complexes was correlated with the geometry of its coordination sphere, more precisely with the structural D_{struc} parameter [1,2]. From the correlation found it follows that the more deformed coordination sphere manifests itself by a higher D value. Following this finding, we have been motivated to study the system Ni(II) hydroxide, benzoic acid (HBz), and 2,2'-bipyridine (*bpy*). From this system, we have isolated two complexes, namely $[\text{Ni}(\text{bpy})(\text{Bz})_2]$ (**1**) as green needles and $[\text{Ni}(\text{bpy})_3](\text{Bz})_2 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ (**2**) in the form of pink microcrystalline powder. The crystal structure of **1** was already studied at room temperature [3] but we have redetermined its crystal structure at both 294 K and 103 K. The crystal structure of **1** is molecular and the Ni(II) central atom is coordinated by one chelating *bpy* ligand and two chelating *Bz* ligands with sharp O-Ni-O bite angles (62.89(8) and 62.65(9)° at 173 K). Only minor differences concerning the geometric parameters for the two determinations were found. Spectral data suggest ionic bonding of *Bz* anions in **2**. Its dehydration was followed by *in-situ* temperature-dependent IR spectroscopy. The magnetic properties of **1** were studied in the temperature range 1.8–300 K showing that **1** represents a system of weakly interacting spin-1 centers with a relatively strong axial zero-field splitting with $D/k_B = -6.3$ K and strong rhombicity $E/D = 0.329$. Theoretical first-principle calculations using the *ORCA* package corroborated the experimentally found magnetic parameters.

Slovak grant agencies APVV-18-0016, vvg-2020-1657, and vvg-pf-2020-1425 are acknowledged for financial support. Support from grant 0-PGC2018-093451-B-100 (Spain) is also acknowledged.

- [1] Titiš J., Boča R.: *Inorg. Chem.* 49, 3971-3973 (2010).
 [2] Singh S. K., Gupta T., Badkur P., Rajaraman G.: *Chem. Eur. J.* 20, 10305-10313 (2014).
 [3] Baruah A. M., Karmakar A., Baruah J. B.: *Polyhedron* 26, 4479-4485 (2007).

3Po11

CO₂ HYDROGENACE NA KATALYZÁTORECH NA BÁZI OXIDŮ ŽELEZA

Martina Kubíková¹, Libor Kvítek¹, Robert Pucek¹, Aleš Panáček¹

¹*Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Universita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, CZ-77146 Olomouc, Czech Republic; martina.kubikova01@upol.cz*

Oxid uhličitý (CO₂) v atmosféře a jeho negativní dopad na klima je zapotřebí eliminovat. Toho lze dosáhnout mimo jiné jeho konverzí. CO₂ představuje významnou výchozí látku pro syntézu methanu, ethanu, methanolu či vyšších uhlovodíků a alkoholů. [1] Nalezení aktivního a vysoce selektivního katalyzátoru pro CO₂ hydrogenaci je předmětem mnoha studií. Takové katalyzátory jsou zpravidla na bázi oxidů kovů. [2]

V rámci této práce jsou studovány katalyzátory na bázi oxidů železa pro hydrogenaci CO₂. Katalyzátory byly připraveny dvoustupňovou syntézou, kdy v prvním kroku vzniká srážením šťavelan železnatý a ve druhém oxidy železa tepelným rozkladem šťavelanu. [3] Různá rychlost a způsob srážení v prvním kroku syntézy daly vzniku katalyzátorů s různými vlastnostmi (tvar a velikost částic, fázové složení) a především s různým chováním v redukční atmosféře H₂. Katalyzátory byly testovány pro CO₂ hydrogenaci při tlaku pouze 1 bar a teplotě 325 °C. Hlavním produktem reakce je metan a vedlejším oxid uhelnatý. Katalyzátory vykazují různou aktivitu, s čímž souvisí i jejich rozdílná fázová složení po reakci. Aktivními fázemi jsou karbid železa (cementit) a magnetit.

Autoři děkují za finanční podporu vnitřního grantu UP Olomouc projekt IGA_PrF_2021_032.

- [1] Atsba T. A., Yoon T., Seongho P., Lee C.J.: *Journal of CO₂ Utilization.* 44, (2021).

- [2] Jia J., Qian C., Dong Y., Li Y.F., Wang H., Ghossoub M., Butler K.T., Walsh A., Ozin G.A.: *Chemical Society Reviews.* 46, 4631 (2017).

- [3] Halder A., Kilianová M., Yang B., Tyo E.C., Seifert S., Pucek R., Panáček A., Suchomel P., Tomanec O., Gosztola D.J.: *Applied Catalysis B: Environmental.* 225, 128 (2018).

3Po12

FLUORESCENT NANODIAMONDS MODIFIED WITH BIOCOMPATIBLE POLYMERS

Kludia Kvaková^{a,b}, Martin Ondra^c, Jiří Schimer^a, Miroslav Topper^c, Miloš Petřík^c, Zbyněk Nový^c, Helena Raabová^a, Marián Hajdúch^c, Petr Cíglar^{a,*}

^a*Institute of Organic Chemistry and Biochemistry of the Czech Academy of Sciences, Flemingovo náměstí 542/2, 166 10 Prague 6*

^b*Charles University, First Faculty of Medicine, Kateřinská 1660/32, 121 08 Prague 2*

^c*Institute of Translational Medicine, Faculty of Medicine and Dentistry, Palacký University, Hněvotínská 5, 77200 Olomouc*

In the past decade, sentinel node(s) (SN) mapping became standard procedure used in cancer diagnostics. However, agents commonly used in these applications, still have several disadvantages. Fluorescent nanoprobe currently show the most promising results as potential alternatives. Fluorescent nanodiamond (FND) is a biocompatible material which exhibit unique optical properties. Emission maximum of FNDs is in near-infrared region which belongs to the tissue imaging window. Moreover, this fluorescence signal is extremely resistant towards photobleaching. These properties make FND a promising candidate for bioimaging applications.

This work is focused on preparation of FNDs coated with D-mannosylated polyglycerol layer for SN visualisation. Polyglycerol coating overcomes limited colloidal stability of FNDs in the biological environment and enables surface modification. D-mannose targets macrophages, which are abundantly present in the SN. The functionalization with D-mannose was achieved using click chemistry. First, treatment with glycidyl propargyl ether provided alkyne-modified polyglycerol which was connected with azidated D-mannose via click reaction. Resulting particles (both mannosylated and non-mannosylated) were highly stable in the high-salt condition (1 M NaCl) and non-specific protein binding in FBS was completely eliminated. The mannosylated particles interacted specifically

with macrophages and showed enhanced retention in mice lymphatic nodes, providing a clear imaging contrast.

This work was supported by the Czech Science Foundation project no. 18–17071S.

3Po13 POLYMERŇI VRSTVY S NANOČÁSTICEMI STŘIBRA

Libor Kvítek¹, Barbora Štefková¹, Aleš Panáček¹, Robert Prucek¹

¹Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, libor.kvitek@upol.cz

Nanočástice mincovních kovů, zejména pak nanočástice stříbra (Ag NPs), patří mezi nejstudovanější kovové nanomateriály. Hlavním důvodem je jejich vysoká biologická aktivita [1] i zajímavé optické vlastnosti využívané zejména v analytické chemii pro zvýšení citlivosti Ramanovy spektroskopie na základě tzv. povrchového zesílení (SERS). [2] Hlavní problém v reálných aplikacích nanočástic stříbra ale představuje jejich agregátní nestálost. Z tohoto důvodu vznikla tato studie zaměřená na přípravu polydopaminových vrstev s obsahem nanočástic stříbra s cílem studia jak jejich biologické aktivity, tak i využitelnosti v oblasti SERS.

Polydopaminové vrstvy byly připravovány samovolnou polymerací dopaminu ve slabě alkalickém prostředí na skleněný či polymerní substrát. Následně byly na připravené vrstvy nanášeny Ag NPs připravované in-situ redukcí dusičnanu stříbrného buď maltózou v amoniakálním prostředí či citrátem sodným. Takto získané vrstvy byly charakterizovány pomocí UV-VIS, IR, AAS, Ramanovy spektroskopie a také elektronové mikroskopie. U vybraných vzorků byla testována jejich antibakteriální aktivita vůči bakteriím *E. coli*. U vzorků připravených na skleněném substrátu byla také zkoumána možnost jejich využití jako aktivní substrát pro SERS. Tato měření s modelovým analytem (Rhodamin B) ukázala, že některé z připravených vrstev umožňují detekci analytu při velmi nízkých koncentracích na úrovni 10^{-7} mol·dm⁻³.

Autoři děkují za finanční podporu projektu ERDF "Rozvoj předaplikačního výzkumu v oblasti nano- a biotechnologií" CZ.02.1.01/0.0/0.0/17_048/0007323 a vnitřního grantu UP Olomouc IGA_PrF_2021_032.

[1] Ahmad S., Munir S., Zeb N. et al.: *Int. J. Nanomed.* 14, 5087 (2019).

[2] Yadav S., Satija J.: *J. Mat. Chem. B* 9, 267 (2021).

3Po14 SYNTHESIS AND STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF POTENTIAL ANTINEOPLASTIC RUTHENIUM COMPLEXES CONTAINING CURCUMINOIDS

Janka Leskovská¹, Jindra Valentová¹, Eva Fischer-Fodor², Natalia Miklášová¹

¹Comenius University in Bratislava, Faculty of Pharmacy, Department Chemical Theory of Drugs, Kalinčiakova 8, 832 32 Bratislava 3, leskovska5@uniba.sk

²Institute of Oncology "Prof.Dr.I.Chiricuta" Cluj-Napoca, RO-400015, Romania

Curcuminoids are extensively studied phytochemicals derived from turmeric, possessing numerous biological benefits including anticancer activity. The need for the preparation of new derivatives with better pharmacokinetic properties is supported by the low bioavailability and rapid metabolism of natural curcumin. One of the approaches to improve the properties of curcuminoids is the complexation of curcuminoids with transition metals, like ruthenium, palladium, copper, vanadium, etc. Ruthenium complexes as chemotherapeutics showed better selectivity and lower adverse effects compared to cisplatin, particularly in T47D cells and A2780cisR cells and possessed higher anticancer and anti-inflammatory activities [1].

Our work is focused on the preparation of curcuminoid ruthenium complexes containing Ru(bpy)₂(curc)Cl and Ru(dmbpy)₂(curc)Cl (bpy = 2,2'-bipyridine; dmbpy = 4,4'-dimethyl-2,2'-dipyridyl; curc = curcuminoids). Prepared ruthenium complexes exhibited interesting antiproliferative activities based on IC₅₀ values of cytotoxicity measured *in vitro* on human ovarian adenocarcinoma cell lines A2780. We plan to study further also their DNA interactions to explain the mechanism of action of these compounds.

This work was financially supported by the research grants VEGA 1/0145/20 and FaF UK/32/2021.

[1] Bonfili L, et.al. *ChemMedChem* [online]. 2012, 7(11), 2010–2020. ISSN 18607179

3Po15**TESTOVÁNÍ ANTIBAKTERIÁLNÍ AKTIVITY POVRCHŮ DLAŽDIC TVRZENÉHO KAMENE**

Libor Mastný, Renáta Slavětínská, Jana Říhová
Ambrožová

*Vysoká škola chemicko-technologická, Technická
1905/5, 166 28 Praha 6, Libor.Mastny@vscht.cz*

Prezentovaná práce je součástí programu aplikovaného výzkumu a experimentálního vývoje, jehož účastníkem je VŠCHT Praha a hlavním řešitelem Technistone, s.r.o.. Hradec Králové. Jedním z cílů projektu je získání kuchyňských desek tvrzeného kamene s lepšími vlastnostmi z hlediska antibakteriálních účinků. Metodou, jak toho docílit, je využití vhodného typu fotoaktivní titanové běloby. V práci je srovnán vliv obsahu anatasové modifikace titanové běloby v tvrzeném kameni na antibakteriální aktivitu modifikovaných dlaždic při expozici světlu vyzařovanému LED páskami doporučenými pro osvětlení kuchyňských linek.

Pro potřeby testování antibakteriální aktivity povrchů dlaždic s/bez povrchové úpravy byl modifikován postup uvedený v normě ISO 22196:2007. Pro testování antibakteriální aktivity povrchu byl použit bakteriální kmen *Escherichia coli* CCM 3954, který byl oživen ve fyziologickém roztoku v termostatu při teplotě 37 °C až 38 °C po dobu 24 h. Vitalita kmene byla vizuálně hodnocena mikroskopicky na rastru počítací komůrky CYRUS I a kultivačně na selektivním médiu VRBG (ČSN ISO 4832). Vybrané barvy světla LED pásek měly barevnou teplotu – denní bílá 4000-5000 K a teplá bílá – cca 3000 K.

V podmínkách expozice světlu LED došlo za přítomnosti anatasu v dlaždicích tvrzeného kamene ve všech experimentech (obsah pigmentu, typ LED světla, receptura kamene) k výrazné inhibici růstu bakterií *Escherichia coli*., což vede ke zlepšení užitečných vlastností vyrobeného materiálu.

Poděkování: Společný programový projekt vzniká za podpory Ministerstva průmyslu a obchodu, 3 výzva, TRIO.

3Po16**CYANOGRAPHENE@Ag NANOCOMPOSITE: SYNTHESIS AND ANTIBACTERIAL ACTIVITY**

Aleš Panáček¹, Lucie Hochvaldová¹, David Panáček^{1,2}, Aris Bakandritsos², Renata Večeřová³, Lucie Válková¹, Tomáš Malina^{1,2}, Jan Belza^{1,2}, and Libor Kvítek¹

¹*Department of Physical Chemistry, Faculty of Science, Palacký University, 17. listopadu 12, 77146 Olomouc, Czech Republic, ales.panacek@upol.cz*

²*Regional Centre of Advanced Technologies and Materials, Czech Advanced Technology and Research Institute, Palacký University, Křížkovského 8, 779 00 Olomouc, Czech Republic*

³*Department of Microbiology, Faculty of Medicine and Dentistry, Palacký University, Hněvotinská 3, 77515 Olomouc, Czech Republic*

The ability of bacteria to develop resistance to conventional antibiotics as well as to silver and silver nanoparticles is threatening one of the pillars of modern medicine. To mitigate the risk of returning to the pre-antibiotic era, effective agents against pathogens are needed to be developed. Silver nanoparticles strongly bound to cyanographene (GCN/Ag) show high antibacterial activity at very low concentrations (0.2-2 ppm of Ag). Such strong antibacterial activity is higher even than that of ionic silver. Furthermore, GCN/Ag overcomes resistance mechanisms of multi-drug-resistant, and silver-nanoparticle-resistant bacteria, which has been so far an unmet challenge. Due to the strong dative bond between the nitrile groups of GCN and silver there is minimum leaching and thus record cytocompatibility to human cells. This work offers the opportunity to exploit suitably functionalized graphene as a covalent trap for silver, surpassing the antibacterial activity of Ag ions, keeping good biocompatibility and preventing Ag ion leaching and bacterial resistance.

The authors gratefully acknowledge the support provided by the project No. 19-22720S of the Czech Science Foundation.

3Po17**PRÍPRAVA MEĎNATÝCH KOMPLEXOV S BIOAKTÍVNymi LIGANDAMI A ICH POTENCIÁLNE BIOLOGICKÉ VLASTNOSTI**

Karin Preinerová¹, Noémi Molnárová²

¹Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej, Ústav anorganickej chémie, Bratislava, Slovenská republika, karin.preinerova@stuba.sk

²Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav biochémie a mikrobiológie, Bratislava, Slovenská republika

V posledných dekádach sa úsilie vyvinúť nové liečivá sústreďuje na zlúčeniny s prechodnými kovmi. Jednu skupinu z nich predstavujú meďnaté komplexy, ktoré sú v centre záujmu kvôli potenciálnym antikarcinogénnym, antimikrobiálnym a protizápalovým účinkom [1].

Práve jedny z najslubnejších látok, v množstve klinicky využívaných liečiv, predstavujú deriváty benzimidazolu vykazujúce nízke štruktúrne nároky. Molekuly obsahujúce benzimidazolové jadro majú významné protizápalové, potenciálne antikarcinogénne, antiproliferatívne a antiparazitické vlastnosti [2] a sú využívané ako inhibitory protónovej pumpy (Omeprazol), antihelmintiká (Albendazol, Mebendazol) prípadne antipsychotiká (Pimozid) [3]. Prítomnosť derivátov benzimidazolu v koordinačnej sfére meďnatého iónu spolu s aniónovými ligandami ako sú salicyláty či benzoáty, známe svojimi protizápalovými vlastnosťami, by mohli zvýšiť potenciálnu bioaktivitu vznikajúcich látok.

Naším hlavným zámerom je syntéza meďnatých komplexov s polohovými izomérmí kyseliny metylsalicylovej a metylbenzoovej s dusíkatým ligandom 2-hydroxymetylbenzimidazolom a následne štúdium zmeny reakčných podmienok syntézy na vznikajúce produkty, ktoré sa realizovali zmenou rozpúšťadla a zmenou stechiometrických pomerov reagentov. V tuhej fáze bolo zloženie a čistota komplexov skúmaná spektrálnymi metódami a taktiež monokryštálovou a práškovou difrakčnou analýzou. Pripravené komplexy majú tetragonálne bipyramidálnu geometriu so sumárnym vzorcom $[\text{Cu}(\text{XBz})_2(2\text{-MeBzim})_2]$, v ktorých sa 2-hydroxymetylbenzimidazol (2-MeBzim) koordinuje bidentátne-chelátovo na centrálny atóm a anióny (XBz) sú viazané buď monodentátne alebo bidentátne-chelátovo.

- [1] Tisato, F.; Marzano, C.; Porchia, M.; Pellei, M.; Santini, C. Copper in Diseases and Treatments, and Copper-Based Anticancer Strategies. *Med. Res. Rev.* 2010, 30 (4), 708–749.
- [2] Akhtar, W.; Khan, M. F.; Verma, G.; Shaquiquzzaman, M.; Rizvi, M. A.; Mehdi, S. H.; Akhter, M.; Alam, M. M. Therapeutic Evolution of Benzimidazole Derivatives in the Last Quinquennial Period. *Eur. J. Med. Chem.* 2017, 126, 705–753.
- [3] Boiani, M.; González, M. Imidazole and Benzimidazole Derivatives as Chemotherapeutic Agents. *Mini Rev. Med. Chem.* 2005, 5 (4), 409–424.

3Po18**ŠTÚDIUM METALO-ORGANICKÝCH SIETÍ OBSAHUJÚCICH FLUOROVANÉ LIGANDY**

Dávid Princík¹, Vladimír Zeleňák¹.

¹Katedra anorganickej chémie, Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta UPJŠ, Moyzesová 11, 041 54 Košice. david.princik@student.upjs.sk

Posledné dve dekády prinášajú obrovský rozmach v oblasti polymérnych pórovitých materiáloch známych pod označením MOF. Tieto všestranné materiály dominujú svojou veľkosťou povrchu a vnútorným objemom a z tohoto dôvodu nachádzajú široké uplatnenie ako katalyzátory [1] alebo sorpčné materiály [2]. Napriek veľkým výhodám majú tieto materiály aj nevýhody. Z priemyselného hľadiska je najväčšou nevýhodou hydrolytická lability, ktorá sa prejavuje nutnosťou sušenia použitých plynov alebo rozpúšťadiel, čo navyšuje cenu výroby. Existujú viaceré metódy vedúce k zvýšeniu hydrolytickej odolnosti MOF materiálov, no častokrát vedú k obsadeniu pórov a poklesu sorpčnej kapacity plynov [3].

Uvedená práca sa venuje syntetickej modifikácii MOF komplexov pomocou hydrofóbných ligandov, v ktorých hydrofóbný účinok zabezpečuje aromatický skelet ligandu a atómy fluóru na ňom viazané. Boli pripravené dve série MOF komplexov s referenčným, nefluorovaným ligandom a s jeho fluorovaným derivátom. Prvý ligand reprezentuje kyselina bifenyľ-4,4'-dikarboxylová (H_2BPDC), s ktorou boli úspešne pripravené MOF komplexy za použitia Zn^{2+} , Ba^{2+} , Ce^{3+} , Fe^{3+} , Cr^{3+} , La^{3+} , Yb^{3+} a Zr^{4+} solí. Druhý ligand reprezentuje kyselina 3,3',5,5'-tetrafluorobifenyľ-4,4'-dikarboxylová ($\text{H}_2\text{4FBPDC}$), s ktorou boli pripravené MOF komplexy za použitia Ba^{2+} , Ce^{3+} , Cr^{3+} a La^{3+} solí a

všetky pripravené MOF komplexy boli podrobené IR, TG a SXRD meraniam potvrdzujúcim ich zloženie. Experimentálne výsledky potvrdzujú zvýšenú stálosť fluorovaných derivátov oproti referenčným komplexom. Detailné informácie budú prezentované na konferencii.

Táto práca bola podporená Vedeckou grantovou agentúrou - projekt VEGA 1/0865/21.

- [1] Li S., Zhang Y., Hu Y., Wang B. a kol.: *J. Materiomics*. 7, 1029 (2021)
 [2] Qiu Q.-F., Chen C.-X., Zeng Z., a kol.: *Inorg. Chem.* 59, 14856 (2020)
 [3] Jiang S.-Y., He W.-W., Li S.-L. a kol.: *Inorg. Chem.* 57, 6118 (2018)

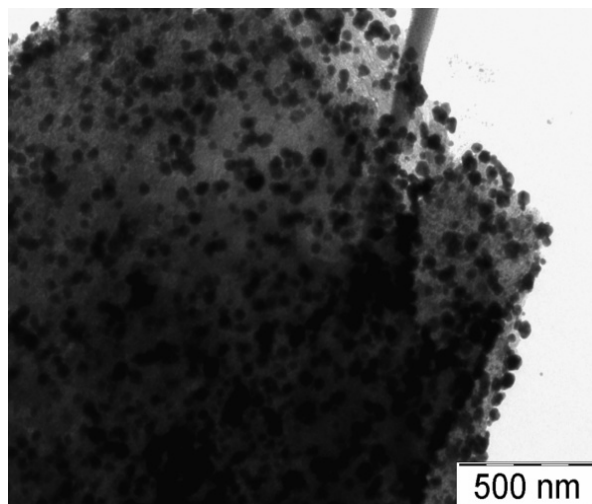
3Po19

SYNTÉZA NANOMPOZITŮ NANOČÁSTIC STŘÍBRA NANESENÝCH NA OXIDU HLINITÉM

Robert Prucek¹, Aleš Panáček, Libor Kvítek

Katedra fyzikální chemie, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. Listopadu 12, 771 46 Olomouc, Česká Republika, robert.prucek@upol.cz

V prezentované studii byly zkoumány možnosti přípravy nanočástic stříbra kde jako substrát byl použit oxid hlinitý. Tyto kompozity byly připravovány chemickou redukcí stříbrných iontů za použití různých redukčních činidel (maltosa, tetrahydridoboritan sodný, hydrazin). Byl také studován vliv hodnoty pH, vliv přítomnosti stabilizátoru (polyakrylát sodný), vliv přítomnosti komplexního činidla stříbrných iontů (amoniaku) na charakteristiky připravených kompozitů. Snahou bylo najít nejvhodnější experimentální podmínky za účelem dosažení postupu umožňujícího přípravu kompozitu nanočástic stříbra na oxidu hlinitém s optimálními charakteristikami, velikost stříbrných nanočástic, jejich monodisperzita, efektivita zachycení nanočástic Ag na povrchu oxidu hlinitého. Množství a vzhled stříbra vyredukovaného na povrch oxidu hlinitého bylo charakterizováno pomocí metod transmisní elektronové mikroskopie a atomové absorpční spektroskopie.



Obr. 1 TEM snímek kompozitu nanočástic Ag na Al₂O₃ připraveného použitím maltosy jako redukčního činidla.

Práce vznikla za finanční podpory projektu IGA_PrF_2021_032.

- [1] Sayah, E. *Applied Catalysis A: General* 406 (2011) 94-101.
 [2] Petittio, C. *Springer, Catal. Lett* (2012) 142:433-438.
 [3] Bala, T. *Journal of Colloid and Interface Science* 356 (2011) 395-403.

3Po20

MULTIVRSTVÉ ANTIBALISTICKÉ CERMETY NA BÁZI TITANU

Vlastimil Brožek¹, Zdeněk Kutílek¹, Libor Mastný², Ondřej Ruml², Ivo Marek², Filip Průša², Pavel Rohan³

¹Ústav fyziky plazmatu AVČR v.v.i. Praha, za Slovankou 3, 182 00 Praha 8, brozek@ipp.cas.cz

²Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 1905/5, 166 28 Praha 6, Libor.Mastny@vscht.cz

³ČVUT, Fakulta strojní, Technická 1902/4., 166 07 Praha 6, pavel.rohan@fs.cvut.cz

Antibalistická keramika má mnoho materiálových a tvarových variant, v závislosti na specifikaci jejího použití. Cílem našeho výzkumu byly tvrdé materiály s nejnižší hustotou, určené pro lehké pancéřování. Tomuto kritériu vyhovují SiC, B₄C, TiC, TiN a TiB₂, které jsou však po slinutí značně křehké. Jejich užitná hodnota, především snížení praskání či křehkého lomu se znásobí zabudováním do struktury cermetu. Při přípravě cermetů s titanovou maticí však dochází k tvorbě dalších binárních sloučenin, které mění stechiometrii povrchových vrstev a ovlivňují finální mechanické vlastnosti vzniklého kompozitu. Jejich vznik difúzním mechanismem a jejich množství je ovlivněno teplotou a dobou kontaktu matrice a plniva. Metoda SPS (Spark

Plasma Sintering) umožnila maximální zkrácení doby existence komponent cermetu v kapalném stavu a stanovení koeficientů reaktivní difúze. Návary cermetů systému Ti-B₄C v různém stechiometrickém poměru v dusíkové atmosféře na podložkách z titanové folie byly realizovány metodou PTA (Plasma Transfer Arc) s cílem dosáhnout vytvoření několika mezivrstev s rozdílnými dilatačními koeficienty. I při krátké době ohřevu na 1500°C byl v produktu rtg. analýzou zjištěn hexagonální TiB₂, s tvrdostí HV=2800 N/mm². Připravené vzorky byly podrobeny zkouškám antibalistické odolnosti proti pláštěvaným projektilům ráže 38 special. Vyhovující antibalistické vlastnosti mají kombinované cermetové vrstvy Ti-TiB₂-Ti-B₄C-TiN tloušťky do 3 mm s hmotností do 3,5g/cm².

3Po21

POLYMERNÍ NANOSTRUKTURY, JEJICH MODIFIKACE A INTERAKCE S BUŇKAMI

P. Slepíčka¹, J. Siegel¹, N. Slepíčková Kasálková¹, O. Lyutakov¹, Z. Kolská², V. Švorčík¹

¹Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 16628 Praha, Česká Republika

²Univerzita J. E. Purkyně, Materiálové centrum, České Mládeže 8, 40096 Ústí nad Labem, Česká Republika

Polymerní nanostrukturované materiály lze považovat za velmi perspektivní v oblasti interakce s buňkami, v kombinaci s metalickými nanodráty je lze úspěšně použít pro konstrukci antibakteriálních materiálů a povlaků a nacházejí také široké využití v oblasti senzorů. Jedním z nejúčinnějších způsobů přípravy takových kompozitů je kombinace excimerové laserové modifikace polymerních materiálů a vakuové napařování ušlechtilých kovů. Laserové ošetření lze úspěšně aplikovat na změny ve fyzikálně-chemických vlastnostech povrchu a/nebo pro selektivní změnu morfologie povrchu s konstrukcí vzoru. V rámci práce jsou prezentovány tři hlavní aplikace laserem indukovaných struktur, což je kontrola a zlepšení cytocompatibility s možností řízeného růstu buněk a aplikace nanostruktur jako detekční systém na bázi substrátu a plazmonu. Interakce buněk s odlišnou morfologií polymeru a zesílení buněčné reakce je využitelné rámci následných bioaplikací. Ag i Pd nanodráty na vzorovaných polymerech vykazují silné antibakteriální vlastnosti. Pouze Pd kompozity však splňují podmínku buněk bezpečnosti, což z nich činí vhodné kandidáty pro použití v antibakteriálních

povlacích. Bylo rovněž ukázáno významné vylepšení optické odezvy specifických (bio) organických molekul na LIPSS substrátu. Pro další vylepšení platformy senzorů souvisejících s plazmonovou rezonancí na periodickém nanovzoru je však nutná následná funkcionalizace specifickými molekulami.

Autoři děkují za podporu grantu GAČR č. 21-05506S a grantu MZ ČR č. NU20-08-00208.

3Po22

PŘÍPRAVA A VLASTNOSTI SPECIFICKÝCH UHLÍKOVÝCH NANOSTRUKTUR

Nikola Slepíčková Kasálková¹, Petr Slepíčka¹, Alžběta Turnovská¹, Václav Švorčík¹

¹Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 16628 Praha, Česká Republika, nikola.kasalkova@vscht.cz

Uhlík je nekovový chemický prvek, jeden z nejzastoupenějších prvků na zemi. Nejzajímavější vlastností uhlíku je schopnost tvořit nespočet chemicky stabilních alotropních struktur a to své díky vaznosti, která mu díky rozlišnému uspořádání propůjčují různé chemické a fyzikální vlastnosti. Q-uhlík (z anglického quenched) vykazuje unikátní mechanické, chemické a fyzikální vlastnosti (feromagnetismus za pokojové teploty, negativní elektronová afinita, vyšší tvrdost než diamant) a vzniká přeměnou tenkých vrstev amorfního uhlíku za použití nanosekundového pulzního laseru - tavením a následným ultrarychlým „kalením“ (quenching) amorfního uhlíku [1-3]. Rozhodujícími faktory při tvorbě Q-uhlíku jsou nejen parametry laserového záření, ale i typ použitého substrátu a kvalita a vlastnosti uhlíkových vrstev. K tvorbě Q-uhlíku dochází pouze při „ideálních“ podmínkách, v ostatních případech může docházet k vzniku celé řady různých uhlíkových struktur a nanostruktur.

Tento způsob přípravy/modifikace povrchu lze však využít i pro nanostrukturování povrchů, jejichž povrchová vrstva není složena pouze z jednoho typu materiálu (uhlík), ale tvoří jí více materiálů (kov, uhlík apod.). V případě použití kombinace vrstev uhlík/zlato bylo zjištěno, že tloušťka původní deponované uhlíkové vrstvy významně ovlivnila jak kvalitu vzniklé povrchové vrstvy tak i hustotu, tvar a velikost nanoklastrů. K tvorbě nanoklastrů došlo vlivem procesu dewettingu, který způsobil narušení spojitosti připravených vrstev protrháním struktury.

Autoři děkují za podporu grantu GAČR č. 20-02120S

- [1] Yoshinaka, H.; Inubushi, S.; Wakita, T.; Yokoya, T.; Muraoka, Y.: *Carbon*. 167, 504 (2020).
 [2] Narayan, J.; Bhaumik, A.: *Mater. Res. Lett.* 4, 118 (2016).
 [3] Sachan, R.; Gupta, S.; Narayan, J.: *ACS Appl Mater Inter.* 12, 1330 (2020).

3Po23

CRYSTALLOCHEMISTRY OF Ni(II) COMPLEXES BASED ON CHELATING NEOCUPROINE LIGAND

Richard Smolko¹, Juraj Černák¹, Michal Dušek², Juraj Kuchár¹

¹ Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, Pavol Jozef Šafárik University in Košice, Slovakia

² Department of Structure Analysis, Institute of Physics, Czech Academy of Sciences, Prague, Czech Republic

Correspondence address:

richard.smolko@student.upjs.sk

Penta-coordinated complexes of Ni(II) (S = 1) represent promising magnetically active materials as in these Ni(II) ion may exhibit large value of single ion magnetic anisotropy [1].

The synthetic strategy leading to penta-coordination may be based on the use of suitable voluminous ligands, e.g. chelating N,N-donor ligand *neoc* (2,9-dimethyl-1,10-phenantroline). Previously, some Ni(II) complexes containing this ligand were reported [2,3].

Within our attempts to prepare such complexes, we have experimentally revisited the systems based on Ni(II) and *neoc*. Our synthetic experiments using various starting Ni(II) salts and water/ethanol solutions yielded four Ni(II) complexes comprising *neoc* ligand in its coordination sphere. In addition, as co-ligands and/or competitive ligands *bapa* (bis(3-aminopropyl)amine) as N,N,N-donor ligand and *pdca*²⁻ as N,O-donor ligand (*H₂pdca* = pyridine-2,6-dicarboxylic acid) were used.

From experimental systems containing Ni(NO₃)₂, *neoc* and additional ligands *pdca*²⁻ or *bapa* four complexes, among these 3 novel, were isolated and structurally characterized.

This work was supported by project(s) APVV-18-0016, VVGS-PF-2020-1425 and VVGS-2020-1657.

- [1] Nemeč, R. Herchel, I. Svoboda, R. Boča, Z. Trávníček, *Dalton Trans.*, 44 (2015) 9554-9560.
 [2] Ding, C. Miao, Y. Tian, B. Li, X. Zhang, S.: *Acta Cryst. Sect. E*, 62 (2006) 1062-1063.

- [3] [3] Warad, I. Hammouti, B. Hadda, T.B. Boshala, A. Haddad, S.F.: *Res. Chem. Intermed.*, 39 (2013) 4011

3Po24

IMPACT OF ATMOSPHERIC PRESSURE PLASMA TREATMENT ON SURFACE METALLIZATION OF CFRP COMPOSITES

L.D. Rafailović^a, M. Stupavská^b, V. Prysiashnyi^c, G. Polt^d, O. Rohr^e, S. Nixon^f, J. Rahel^b

^a CEST Center of Electrochemical Surface Technology, Viktor-Kaplan Strasse 2, 2700 Wiener Neustadt, Austria

^b Masaryk University, Department of Physical Electronics, Kotlářská 2, 61137 Brno, Czech Republic, stupavska@mail.muni.cz

^c Masaryk University, Department of Chemistry, Kamenice 5, 62500 Brno, Czech Republic

^d Isosport, Industriestrasse 2-8, 7000 Eisenstadt, Austria

^e Airbus Defence and Space GmbH, Willy-Messerschmitt-Str. 1, 82024 Taufkirchen, Germany

^f Airbus Defence and Space GmbH, Rechliner Str., 85077 Manching, Germany

Carbon fiber reinforced composites (CFRP) were activated by atmospheric pressure plasma source to improve the performance of galvanically plated Cu layer on its surface. Plasma activation was done by use of diffuse coplanar surface barrier discharge. Owing to its fabric structure, the morphology and chemical composition of CFRP structure is inherently heterogeneous. Therefore, the attention has been paid to mutual comparison of plasma induced chemical changes and the actual performance of metalized layers at morphologically distinct areas of CFRP surface. To evaluate these performances the XPS, FTIR, determination of surface free energy, nanoindentation, SEM and scratch tests were employed. The chemical analysis confirmed that the positive effect of plasma pre-treatment can be attributed to the introduction of the polar oxygen containing groups: -C=O and -O-C=O into the thin topmost epoxy resin areas, and -C-OH into thick inter-yarn epoxy resin areas. The results also showed that optimized plasma activation can mitigate the adhesion differences between the distinct surface structures.

The work at CEST was supported within the COMET program (No. 865864) by the Austrian Research Promotion Agency (FFG) and the governments of Lower and Upper Austria. This research was additionally supported by the project CZ.01.05/2.1.00/03.0086 funded by European

Regional Development Fund and project LO1411 (NPU I) funded by Ministry of Education Youth and Sports of Czech Republic.

3Po25

REAKCE FLUORIDU VÁPENATÉHO V ELEKTRICKÉM VÝBOJI

Libor Mastný¹, Miroslav Šimek¹, Martina Kohoutková¹, Ivo Marek¹, Vlastimil Brožek²

¹Vysoká škola chemicko-technologická, Technická

1905/5, 166 28 Praha 6, Libor.Mastny@vscht.cz

²Ústav fyziky plazmatu AVČR v.v.i. Praha, za Slovankou 3, 182 00 Praha 8, brozek@ipp.cas.cz

Při likvidaci freonů rozkladem při teplotách 5000 K – 30 000 K ve vodou stabilizovaném plazmatu v reaktoru, vyvinutém v rámci řešení grantu „Rozklad perfluorovaných sloučenin poškozujících ozonovou vrstvu v termálním plazmatu“ vzniká směs fluoru a fluorovodíku. Neutralizace předmětné směsi při výstupu z reaktoru je snadná. Uvnitř reaktoru však dochází k nadměrné korozi materiálu „vyzdívky“ fluorovodíkem. Konstrukční ochrana součástí reaktoru je možná jen povlaky z SiC nebo CaF₂, neboť obě tyto sloučeniny s fluorovodíkem nereagují. Při vyvážení povlaků z fluoridu vápenatého plazmovým nástřikem však dochází k mimořádnému jevu – přeměně CaF₂ na CaO. Reakce CaF₂ + O₂ = CaO + OF₂ nebo CaF₂ + H₂O = CaO + 2 HF je podle termodynamických výpočtů z extrapolovaných dat možná teprve až nad teplotou 5000 K. K ověření mimořádného jevu přeměny fluoridu na oxid je nutná extrémně vysoká teplota, k dispozici dosažení teploty nad 5000 K je pouze plazmový nebo elektrický výboj. Na VŠCHT byla vyvinuta aparatura s klouzavým elektrickým výbojem (glid-arc), na které byl tento fakt potvrzen následnou rtg.difrakční analýzou produktu s obsahem 2 ± 0,5% oxidu vápenatého.

Poděkování: Tato práce byla podpořena Grantovou agenturou ČR v rámci projektu č. GC17-10246J.

3Po26

ADVANCES IN THE COORDINATION CHEMISTRY OF Ni(II) COMPLEXES WITH AMINOALKYLPYRIDINES AS CHELATING N-DONOR LIGANDS

Slavomíra Šterbinská, Juraj Černák, Juraj Kuchár

Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Sciences, P. J. Šafárik University in Košice, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovakia, slavomira.sterbinska@student.upjs.sk

Complexes of Ni(II) (*S* = 1) belong to the class of attractive magnetic materials widely studied at present. In quest for novel Ni(II) complexes aimed as synthons for heterospin systems we have undertaken an experimental synthetic study of the systems based on various starting Ni(II) salts and aromatic-aliphatic N,N'-donor ligands, namely 2-aminomethylpyridine (*2ampy*) and 2-aminoethylpyridine (*2aepy*). As starting salts were chosen chloride, nitrate and perchlorate due to their enhanced solubility in some non-aqueous solvents. Using various molar ratios, from the above mentioned systems seven solid coordination compounds were isolated in the single crystal form suitable for X-ray study, namely [Ni(*2ampy*)₂(NO₃)₂] with molecular crystal structure and six ionic complexes [Ni(*2ampy*)₂(H₂O)₂]Cl₂, [Ni(*2aepy*)₂Cl(H₂O)]Cl·H₂O, [Ni(*2aepy*)₂(NO₃)]NO₃, [Ni(*2ampy*)₃](ClO₄)₂ and [Ni₄(CO₃)₂(*2aepy*)₂](ClO₄)₂, and [Ni(*2aepy*)(*2ampy*)Cl(H₂O)]Cl·H₂O [1-3]. The last mentioned complex represents the very rare example of a complex in which both type of ligands *2ampy* and *2aepy* are present in the same coordination sphere. All complexes were structurally fully characterized and their supramolecular structures were studied, too.

This work was supported by grants APVV-18-0016, VVGS-PF-2020-1425 and VVGS-2020-1657.

- [1] Bruda S., Turnbull M., Landee Ch., Xu Q.: *Inorg. Chim. Acta* 359, 298-308 (2006).
- [2] Šterbinská S., Holub M., Kuchár J., Čížmár E., Černák J.: *Polyhedron* 187, 114654 (2020).
- [3] Tanase S., Ferbinteanu M., Andruh M., Mathonière C., Strenger I., Rombaut G.: *Polyhedron* 19, 1967-1973 (2000).

3Po27

MECHANISTIC STUDY OF SYNERGISTIC ANTIBACTERIAL EFFECT OF SILVER NANOPARTICLES COMBINED WITH VANCOMYCIN AGAINST *E. FAECIUM* USING FLUORESCENCE MICROSCOPY

Lucie Válková^{1,2}, Lucie Hochvaldová¹, Martin Mistrík³, Renata Večeřová⁴, Milan Kolář⁴, Libor Kvítek¹, and Aleš Panáček¹

¹ Department of Physical Chemistry, Faculty of Science, Palacký University, 17. listopadu 12, 77146 Olomouc, Czech Republic, lucie.valkova@upol.cz

² Department of Medical Biophysics, Faculty of Medicine and Dentistry, Palacký University, Hněvotinská 3, 77515 Olomouc, Czech Republic

³ Institute of Molecular and Translational Medicine, Faculty of Medicine and Dentistry, Palacký University and University Hospital in Olomouc, Hněvotinská 5, 77515 Olomouc, Czech Republic

⁴ Department of Microbiology, Faculty of Medicine and Dentistry, Palacký University, Hněvotinská 3, 77515 Olomouc, Czech Republic

Silver nanoparticles (NPs) strongly enhance antibacterial activity against broad spectrum of bacterial strains when combined with antibiotics [1]. However, the mechanism of their synergistic effect is not yet fully understood and may vary for different bacterial strains and antibiotics [2]. In this work we present a mechanism of the combined antibacterial effect of silver NPs and vancomycin against *E. faecium* strain sensitive and resistant to vancomycin. For the first time the synergistic mechanism was described based on the localization of fluorescent labeled silver NPs and vancomycin-BODIPY FL fluorescent conjugate using high resolution fluorescence microscopy. It can be concluded that the synergistic effects of silver NPs and vancomycin mainly consists in the mutual disruption of the permeability and strength of the cell wall, which becomes unstable and loses its strength and it is subsequently disrupted and detached. In addition, silver NPs significantly deform bacterial DNA, which also significantly contributes to the inhibition of bacterial growth. This work can help to better understand the mechanisms of synergistic effects of silver NPs with antibiotics against resistant bacteria which represent an important finding for potential approach to an effective fight against the unresolved problem of an increasing resistance of pathogenic bacteria against traditional antibiotics.

The authors gratefully acknowledge the support provided by the project No. 19-22720S of the Czech Science Foundation.

[1] Panáček, A. et al.: *Colloids Surfaces B Biointerfaces* 142, 392 (2016).

[2] Kumar, S., Mukherjee, M. M. & Varela, M. F. *Int. J. Bacteriol.* 2013, ID 204141, (2013)

3Po28

ODSTRAŇOVANIE ⁶⁰Co A ⁹⁹Tc Z VODNÝCH ROZTOKOV SORBETMI NA BÁZE UHLÍKA

Eva Viglašová¹, Michal Galamboš¹, Silvia Vyhnáleková¹, Martin Daňo², Darina Tóthová¹

¹Katedra jadrovej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzity Komenského v Bratislave, Mlynská dolina, Ilkovičová 6, 842 15 Bratislava, Slovensko, eva.viglasova@uniba.sk

²Katedra jaderné chemie, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, České vysoké učení technické v Praze, Břehová 7, 91100 Praha, Česká republika

Charakteristické povrchové a štruktúrne vlastnosti sorbentov na báze uhlíka, ako pórovitá štruktúra, merný povrch, funkčné skupiny na povrchu, predurčujú ich využitie v sorpčných procesoch pri odstraňovaní rôznych kontaminantov. Povrchovú štruktúru týchto materiálov môžeme ovplyvniť výberom vhodnej vstupnej suroviny, nastavením vhodného postupu prípravy, no najmä vhodnou modifikáciou resp. aktiváciou povrchu môžeme meniť povrchové vlastnosti, a tým zvýšiť sorpčnú schopnosť daných materiálov. Bola pripravená séria sorbentov na báze uhlíka, kde ako vstupná surovina bol použitý odpadový kaučuk a papierovina. Chemickou aktiváciou povrchu s KOH a/resp. 15 % ZnCl₂ sme dosiahli zmeny na povrchu, ktoré umožnili odstraňovanie aj aniónových foriem kontaminantov a zvýšenie % sorpcie. Pri charakterizácii materiálov sme stanovili morfológiu a štruktúru povrchu pripravených materiálov, SEM/EDS analýzou boli pozorované zmeny na povrchu po aktivácií, ako aj potvrdené charakteristických prvky na povrchu. FT-IR metóda určila funkčné skupiny na povrchu pripravených materiálov. Sorpčnými experimentami sme skúmali vplyv jednotlivých parametrov na sorpčnú schopnosť, vplyv zmeny hodnoty pH, doby kontaktu a konkurenčných iónov na sorpciu ⁹⁹TcO⁻ a ⁶⁰Co. Študované materiály preukázali vhodnosť skúmaných sorbentov pre odstraňovanie ⁹⁹TcO⁻ a ⁶⁰Co z vodných roztokov.

Táto práca bola podporená Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe Zmluvy č. APVV-18-0534.

[1] Viglašová E., Galamboš M.: *Waste Management.* 79 (2018).

- [2] Daňo M., Viglašová E.: *Materials*. 13, 14 (2020).
 [3] Hashemi B.: *Microchim. Acta*. 186 (2019).

3Po29

CHEMICKÉ MODIFIKACE POVRCHŮ POLYMERŮ, ROUBOVÁNÍ ČÁSTIC SÍRY A OXIDŮ ŽELEZA NA POVRCHY POLYMERŮ, CHARAKTERIZACE PŘIPRAVENÝCH MATERIÁLŮ

Zdeňka Kolská¹, Simona Lupínková¹, Monika Benkocká¹, Václav Švorčík², Petr Sajdl², Martin Orendáč²

¹Ústecké materiálové centrum, Přírodovědecká fakulta, Univerzita J. E. Purkyně v Ústí nad Labem, Pasteurova 15, 40096 Ústí nad Labem, zdenka.kolska@ujep.cz

²Ústav inženýrství pevných látek, Fakulta chemické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 3, 16628 Praha, vaclav.svorcik@vscht.cz

Povrchy různých polymerů byly nejprve aktivovány a následně roubovány chemickými sloučeninami s cílem buď připravit antimikrobiální povrchy [1] nebo následně roubovat na povrchy částice síry nebo oxidů železa [2]. Takto připravené nové materiály mohou nalézt využití v lékařství jako materiály s antibakteriálním či antimikrobiálním chováním či mohou být potenciální materiály pro využití ve spintronice [1,2].

Byly studovány (i) různé metody aktivace povrchů polymerů; (ii) různé metody přípravy částic síry a oxidů železa; (iii) různá činidla pro stabilizaci částic; (iv) různá činidla pro roubování povrchů aktivizovaných polymerů pro rozdílné aplikace.

Povrchové vlastnosti všech testovaných polymerů byly charakterizovány před aktivací i po jednotlivých krocích modifikace dostupnými technikami: XPS, goniometricky, elektrokinetickou analýzou pro určení změn chemie, náboje a smáčivosti na povrchu testovaných materiálů; AFM a SEM pro zjištění změn drsnosti a morfologie povrchu a velikosti testovaných částic; adsorpční a desorpční isothermou a BET a BJH analýzami pro stanovení velikosti povrchu a porozity materiálů; DLS analýzou pro stanovení velikosti a zeta potenciálu testovaných částic.

Na vybraných vzorcích byly následně provedeny antibakteriální testy.

Všechny použité techniky prokázaly (i) úspěšnou aktivaci povrchů polymerů, (ii) následně

chemické roubování povrchů materiálů, (iii) imobilizaci testovaných částic síry a železa, (iv) antibakteriální chování některých testovaných povrchů.

Práce byla podpořena Grantovou agenturou ČR (GAČR), projektem č. 20-01768S.

- [1] Benkocká M, Lupínková S, Knapová T, Svorčík V, Matousek J, Kolska Z.: *Mater. Sci. Eng. C-Mater.* 96, 479 (2019).
 [2] Lupínková S, Kaimlová M, Kormunda M, Kolská Z.: *Surf. Interface Anal.* 53, 108 (2021).

3Po30

BIOKOMPATIBILITA MODIFIKOVANÉ BAKTERIÁLNÍ CELULÓZY

A. Kutová¹, L. Staňková², O. Kvítek¹, Z. Kolská³, L. Bačáková², V. Švorčík¹

¹Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 16628 Praha, Česká Republika

²Fyziologický ústav Akademie věd České Republiky, Vídeňská 1038, 14220 Praha, Česká Republika

³Univerzita J. E. Purkyně, Materiálové centrum, České Mládeže 8, 40096 Ústí nad Labem, Česká Republika

Díky své nanostruktúře má bakteriální celulóza (BC) oproti “rostlinné” řadu výhod, vykazuje však slabou biokompatibilitu. Proto jsme se v této práci zaměřili na její povrchovou modifikaci. Hydrogely BC byly připraveny užitím bakteriálního kmene *Komagataeibacter sucrofermentans*. Tyto hydrogely pak byly převedeny do suchého stavu sušením na vzduchu (BC-AD) nebo lyofilizací (BC-L). Vysušené vzorky byly následně povrchově modifikovány argonovým plazmatem. SEM ukázala, že oproti BC-AD si BC-L vzorky zachovávaly svou nanostrukturu a i vyšší porozitu, která po plazmatické modifikaci dále narostla. XPS prokázala, že po plazmatické modifikaci narůstá obsah kyslíku v chemickém složení povrchových vrstev. Vzorky byly následně použity pro *in-vitro* testy s lidskými keratynocyty (HaCaT). Tyto experimenty ukázaly, že zatímco iniciační adheze HaCaT je vyšší na BC-L, následný růst těchto buněk a konečná hustota buněčné populace byly vyšší na BC-AD. Bylo také doloženo, že expozice v plazmatu výrazně zvyšuje konečnou kolonizaci buněk, kdy dochází k vytvoření souvislé buněčné vrstvy na celulóze. Naše práce prokazuje, že povrchově modifikovaná BC je materiál s potenciálním využitím ve tkáňovém inženýrství a v oblasti hojení ran.

Poděkování: autoři děkují Grantové agentuře ČR v projektu č. 20-01641S.

3Po31

SYNTHESIS, CHARACTERIZATION OF CHITOSAN LAYERED DOUBLE HYDROXIDE ION-IMPRINTED POLYMER FOR COPPER ION REMOVAL

Vipul Vilas Kusumkar¹, Eva Viglašová, Michal Galamboš

¹Department of Nuclear Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University in Bratislava, Mlynska dolina Ilkovicova 6, 842 15 Bratislava, Slovakia

Metal ion contamination in water from various human activities increasing continuously day by day. Copper ion is the major contributor to water contamination. Different technologies are used for copper ion removal, such as ion exchange, biosorption, chemical precipitation, membrane separation, and adsorption. Adsorption is a versatile technique for removing ions due to the wide range of material choices, ease of operation and cost-effectiveness. Still, it lacks selective and specificity for analytes. Ion imprinted polymers (IIPs) provides cavities for the targeted ion of its shape with predefined binding sites[1]. Chitosan (CS) is a biodegradable, biocompatible, and readily available polymer used for ion-imprinted material preparation[2]. Layered double hydroxides (LDH) are known for their adsorption properties and ease of preparation[3]. In this work, we prepared chitosan and LDH based ion-imprinted polymer (CS-LDH IIP), which shows excellent adsorption efficiency for Copper ions compared to non-imprinted polymer(NIP). The prepared material is characterized using physicochemical and spectrochemical methods such as FT-IR, XRD, TGA, and SEM to understand the structural and adsorption mechanisms of the material.

- [1] V.V. Kusumkar, M. Galamboš, E. Viglašová, M. Daňo, J. Šmelková, Ion-Imprinted Polymers: Synthesis, Characterization, and Adsorption of Radionuclides, Materials (Basel). 14 (2021) 1083.
- [2] A. Karrat, A. Lamaoui, A. Amine, J.M. Palacios-Santander, L. Cubillana-Aguilera, Applications of chitosan in molecularly and ion imprinted polymers, Chem. Africa. (2020) 1–21.
- [3] M. Li, A. Dopilka, A.N. Kraetz, H. Jing, C.K. Chan, Layered double hydroxide/chitosan nanocomposite beads as sorbents for selenium oxoanions, Ind. Eng. Chem. Res. 57 (2018) 4978–4987.

3Po32

POVRCHOVÉ ÚPRAVY POLYETHYLENNAFTALÁTU ZA VYUŽITÍ BIMETALICKÝCH NANOSTRUKTUR

Jana Pryjmaková¹, Markéta Kaimlová¹, Barbora Vokatá², Tomáš Hubáček³, Petr Slepíčka¹, Václav Švorčík¹, Jakub Siegel¹

¹Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika

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

³Biologické centrum, Akademie věd České republiky, Na Sádkách 7, 370 05 České Budějovice, Česká republika

Morfologie a povrchová chemie mají zásadní vliv na interakci mezi implantátem a lidským tělem a také na správnou funkci implantátu a jeho bezproblémového zavedení bez vzniku zánětu [1] nebo bakteriální infekce [2, 3]. Řešením tohoto problému je užití biokompatibilního a antibakteriálního materiálu. Slibnými materiály splňující uvedené vlastnosti mohou být nanokompozity polymer-kov. Tento projekt byl zaměřen na vylepšení polyethylenafthalátu (PEN) technikami povrchové modifikace a následnou studii jeho vhodnosti pro biomedicínské aplikace. PEN byl modifikován pomocí KrF laseru vytvářejícího periodické nanostruktury se specifickými povrchovými vlastnostmi. Poté byly na takto upravený substrát nanášeny Au/Ag nanodráty technikou vakuového napařování. Mikroskopie atomárních sil potvrdila změnu povrchové morfologie modifikovaného PEN v závislosti na úhlu dopadu laserového paprsku. Energiově disperzní rentgenová spektroskopie ukázala, že distribuce vybraných kovů byla závislá na technice napařování. Ukazuje se, že naše bimetalické nanodráty představují slibnou antibakteriální úpravu povrchu biokompatibilních polymerů, a to díky vhodné kombinaci kovů. Antibakteriální účinek připravených Au/Ag nanodrátů byl prokázán během 24 hodin inkubace vůči *E. coli* a *S. epidermidis* pomocí kapkových testů. Navíc test cytotoxicity WST-1 ukázal, že materiál lze považovat za netoxický. Souhrnně tyto výsledky naznačují, že připravené bimetalické nanostruktury by mohly být využity jako účinný biokompatibilní povlak v široké škále bioaplikací.

Tento výstup vznikl v rámci projektu Specifického vysokoškolského výzkumu – projekt č. A2_FCHT_2021_040.

[1] Aderson, J.M.: ASAIO Journal, 34, 2 (1988).

[2] Nicolle, L.E.: Antimicrobial resistance and infection control, 3, 23 (2014).

[3] Pavithra, D., Doble, M.: Biomedical Materials, 3, 34003 (2008).

POSTERY - SEKCIA 4 ORGANICKÁ CHÉMIA

4Po01 SYNTÉZA A REAKTIVITA RÔZNE SUBSTITUOVANÝCH [3]DENDRALÉNOV

Rastislav Antal¹, Zbyněk Brůža¹, Ondřej Kratochvíl¹,
Milan Pour¹

¹Univerzita Karlova, Farmaceutická fakulta v Hradci
Králové, Akademiya Heyrovského 1203/8,
500 05 Hradec Králové, Katedra organické
a bioorganické chemie, antalr@faf.cuni.cz

Dendralény sú acyklické skrížene konjugované oligoény so zaujímavou, doposiaľ neprebádanou reaktivitou a vysokým potenciálom pre ďalšiu syntézu [1]. V našej práci sme sa zamerali na prípravu rôzne substituovaných elektrónovo deficitných [3]dendralénov obsahujúcich elektrón-odťahujúce skupiny (napr. karboxylová skupina) alebo kombináciu skupín odťahujúcich a poskytujúcich elektróny. Syntéza je založená na ľahko dostupných Z-metalodiénoch **I** a metaloalkénoch **II**, ktoré vstupujú do Migita-Stilleho kaplingu [2] (schéma 1). Syntézy a ďalšie možné využitia týchto nových zlúčenín **III** napr. v domino Diels-Alderových sekvenciách (schéma 2) budú diskutované.

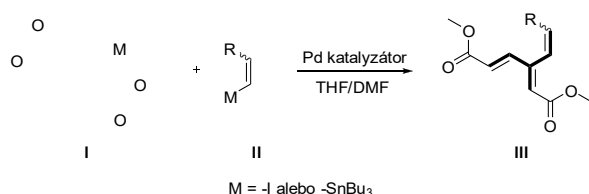


Schéma 1. Migita-Stilleho kapling

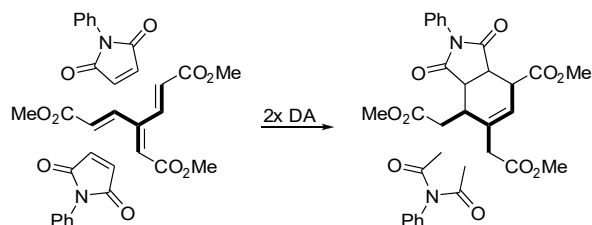


Schéma 2. Diels-Alderové reakcie

Táto práca vznikla za podpory grantu GAČR (r.č. 18-17868S) a Univerzity Karlovej (SVV 260 547, GAUK 1348119).

- [1] Hopf H., Sherburn M.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 51, 2298 (2012).
[2] Kratochvíl J., Novák Z., Ghavre M., Nováková L., Růžička A., Kuneš J., Pour M.: *Org. Lett.* 17, 520 (2015).

[3] (<http://www.prirodnejavy.eu/pokusy/>)

4Po02 DEHALOGENACE V PŘÍTOMNOSTI AKRYLAMIDOVÉ SKUPINY: PŘEKVAPIVÁ REAKTIVITA DVOJNÉ VAZBY PŘI KATALYTICKÉ TRITIO- DEJODACI

Břetislav Brož¹, Reik Löser², Aleš Marek¹

¹Syntéza radioaktivně značených sloučenin, Ústav
organické chemie a biochemie AV ČR v.v.i.,
Flemingovo náměstí 2/542, 16610 Praha 6, Česká
Republika, Bretislav.Broz@uochb.cas.cz

²Institute of Radiopharmaceutical Cancer Research,
Radiopharmaceutical and Chemical Biology,
Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, Bautzner
Landstrasse 400, 01328 Dresden, Germany

Tritium (³H, T) je přírodní radioaktivní izotop vodíku s nízkou energií emitovaného β-záření ($E_{\max} = 18 \text{ keV}$). Jeho zavedení do cílové molekuly umožňuje výjimečně spolehlivě a citlivě detekovat biologicky aktivní látky např. při farmakokinetických studiích. Z chemického, ekonomického i bezpečnostního hlediska je významnou předností možnost značení molekuly až v závěrečném kroku syntetické sekvence. [1]

Jednou z nejrozšířenějších metod zavedení tritia do cílové molekuly je katalytická dehalogenace. V případě přítomnosti dalších citlivých funkčních skupin, které by bylo možné redukovat, je nejvýhodnější použití jódu, který se rychle váže na aktivní centrum katalyzátoru a tato afinita řídí dehalogenaci selektivně i přes to, že např. samotná dvojná vazba by reagovala rychleji. [2,3]

V tomto příspěvku budou diskutovány neobvyklé výsledky dosažené při katalytické redukcii derivátu RW10/20 (Obr. 1). I přes výše uvedené poznatky bylo dosaženo opačné selektivity a hlavním produktem reakce byl derivát se zachovaným atomem jodu, a to buď s kompletně zredukovanou dvojnou vazbou (**A**) nebo se zachovanou dvojnou vazbou nesoucí dva atomy T v geminálním uspořádání (**B**). U minoritního požadovaného produktu dehalogenace pak bylo tritium opět nalezeno i na olefinu v geminálním uspořádání (**C**); izolován byl i přeredukovaný derivát (**D**). Obohacení tritiem bylo jednoznačně potvrzeno pomocí ³H NMR, radio-HPLC a ESI-MS.

| | R ₁ | R ₂ * | Výtěžek** | Spec. Aktivita | Izolováno |
|---|----------------|---------------------------------|-----------|----------------|-----------|
| A | I | CT ₂ CT ₃ | 72 % | neměřeno | 59.7 mCi |
| B | I | CH=CT ₂ | | | |
| C | T | CH=CT ₂ | 13 % | 37.5 Ci/mmol | 9.7 mCi |
| D | T | CT ₂ CT ₃ | 15 % | 80.0 Ci/mmol | 12.8 mCi |
| Pozn.: * maximální dosažené obohacení, ** Radio-HPLC | | | | | |

Obr. 1 Nečekaná reaktivita při katalytické redukcii

Autoři děkují Akademii věd ČR za finanční podporu z programu RVO 61388963.

- [1] Marek A., Pedersen M. H. F.: *Tetrahedron* 71, 917 (2015).
- [2] Voges R., Heys R. J., Moenius T.: *Preparation of Compounds Labelled with Tritium and Carbon-14*; John Wiley & Sons (2009).
- [3] Faucher N., Ambroise Y., Cintrat J.-C., Doris E., Pillon F., Rousseau B.: *J. Org. Chem.* 67, 932 (2002).

4Po03

HORMOPRIMING TO MITIGATE ABIOTIC STRESS EFFECTS: A CASE STUDY OF N9-SUBSTITUTED CYTOKININ DERIVATIVES WITH A FLUORINATED CARBOHYDRATE MOIETY

Magdaléna Bryksová¹, Andrea Hybenová¹, Alba E. Hernandez¹, Ondřej Novák², Aleš Pěňčík², Lukáš Spíchal¹, Nuria de Diego¹ and Karel Doležal^{1,2}

¹Department of Chemical Biology and Genetics, CRH, UPOL, Šlechtitelů 27, 78371 Olomouc, Czech Republic

²Laboratory of Growth Regulators, Palacký University & Institute of Experimental Botany ASCR, Šlechtitelů 27, CZ-783 71 Olomouc, Czech Republic

Plant hormones cytokinins are N⁶-substituted adenine derivatives which regulate many aspects of the plant growth and development. They promote cell division, regulate growth and differentiation and coordinate many physiological processes in plants. [1] Cytokinin molecule can be modified at the C2-, C8- and N9- position by various substituents, such as sugars. For example, the replacement of hydroxyl group with a fluorine atom on the sugar moiety has significant effect on stereoelectronic properties and it also alters the physical and chemical properties with respect to their nonfluorinated counterparts. [2,3] Nucleosides bearing fluorine or fluorinated substituents within the carbohydrate moiety were used previously in biochemical research and

therapeutic treatment, but their influence on plant development has never been investigated.

Based on this fact, we synthesized a group of N⁶-substituted-2'-deoxy-2'-fluoro-9-(β)-D-arabinofuranosylpurine derivatives by the reaction of 9-(2'-deoxy-2'-fluoro-β-D-arabinofuranosyl)hypoxanthine with appropriate amine. Prepared compounds were characterized by various instrumental methods (HPLC-MS, NMR, EA). Their biological activity was evaluated using classical cytokinin bioassays such as leaf senescence, *Amaranthus* and tobacco callus assay, to predict their ability to improve selected plant micropropagation and acclimatization processes. Subsequently, their biological activity *in planta* was also characterized by high-throughput *Arabidopsis* bioassay for using these compounds as seed priming agents with potential to alleviate stress. We confirmed that the priming with prepared nucleosides improved *A. thaliana* growth and tolerance to salt and osmotic stress.

- [1] Kieber J. J., Schaller G. E.: *Development*, 145, dev149344 (2018).
- [2] Kirk K. L.: *Organic Process Research and Development*, 12, 305–321 (2008).
- [3] Thibaudeau C., Plavec J., Chattopadhyaya J.: *Journal of Organic Chemistry*, 63, 4967-4984 (1998).

4Po04

THE SYNTHESIS OF AMIDES AND ESTERS BY Pd⁰-CATALYZED CARBOXYLATIVE C(sp³)-H ACTIVATION WITH [1,4]-Pd SHIFT

Tomáš Čarný,¹ Ronan Rocaboy,² Antonin Clemenceau,² Olivier Baudoin²

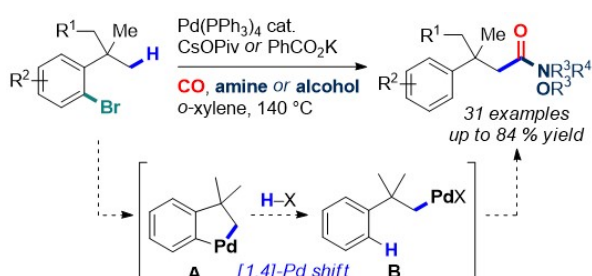
¹Slovak University of Technology, Institute of Organic Chemistry and Petrochemistry, Radlinského 9, SK-812 37, Bratislava, Slovakia tomas.carny@stuba.sk

²University of Basel, Department of Chemistry, St. Johanns-Ring 19, CH-4056, Basel, Switzerland

Pd⁰-catalyzed activations of C(sp³)-H bonds have proven to be a powerful method to construct a C–C bonds and produce an array of useful carbon and heterocycles.^[1a] Trapping of reaction intermediates, such as palladacycles or σ-alkylpalladium complexes, allows formation of various interesting products. Indanes can be formed by trapping of organopalladacycle **A** with dibromomethane,^[1b] while indanones are formed upon trapping with CO.^[1c] The σ-alkylpalladium complex **B** arising from [1,4]-Pd shift can either undergo β-H elimination to form olefins,^[1d,e] or can be trapped by boronic acids or anilines

providing the corresponding arylation or amination products.^[1f,g]

Herein, we report a method for the synthesis of carboxylic derivatives from aryl bromides, proceeding *via* C(sp³)-H activation with [1,4]-Pd shift to give a σ -alkylpalladium intermediate which is further trapped by carbon monoxide and various amines or alcohols.^[2] The corresponding amide and ester products, bearing a quaternary β carbon, were isolated up to 84 % yield (Scheme 1). Mechanistic studies showed that the aminocarbonylation of the σ -alkylpalladium intermediate is fast using PPh₃ as the ligand, and leads to the amide formation rather than the previously reported indanone product.^[1c]



Scheme 1. Pd⁰-catalyzed carbonylative C(sp³)-H activation with [1,4]-Pd shift.

This work was financially supported by Slovak grant agencies VEGA 1/0552/18 and VEGA 1/0766/20, University of Basel and National Scholarship Program of Slovak Republic mediated by SAIA n.o.

- [1] a) Baudoin O.: *Acc. Chem. Res.* 50, 1114 (2017); b) Wu Z., Ma D., Zhou B., Ji X., Ma X., Wang X., Zhang Y.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 56, 12288 (2017); c) Cai S.-L., Li Y., Yang C., Sheng J., Wang X.-S.: *ACS Catal.* 9, 10299 (2019); d) Hitce J., Retailleau P., Baudoin O.: *Chem. Eur. J.* 13, 792 (2007); e) Motti E., Catellani M.: *Adv. Synth. Catal.* 350, 565 (2008); f) Barder T. E., Walker S. D., Martinelli J. R., Buchwald S. L.: *J. Am. Chem. Soc.* 127, 4685 (2005); g) Pan J., Su M., Buchwald S. L.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 50, 8647 (2011).
- [2] Čarný T., Rocaboy R., Clemenceau A., Baudoin O.: *Angew. Chemie. Int. Ed.* 59, 18980 – 18984 (2020).

4Po05

SYNTHESIS OF RACEMIC PYRROLIDINE ALKALOID CODONOPSINOL B FOR CELL PROLIFERATION ASSAYS

Lukáš Ďurina¹, Anna Ďurinová², Ján Moncol³, Róbert Fischer¹

¹Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovak Republic

²Department of Pharmacology and Toxicology, Faculty of Pharmacy in Hradec Králové, Charles University in Prague, Akademika Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, Czech Republic

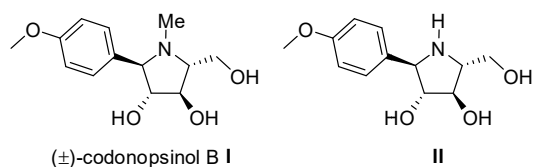
³Institute of Inorganic Chemistry, Technology and Materials, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovak Republic, durina.lukas@gmail.com

The structures of polyhydroxylated pyrrolidine alkaloids represent an important group of biologically active substances, which have a promising potential in treatment of oncological diseases.¹ Our synthetic targets, natural codonopsinol BI and its derivative II show good inhibition activity against α -glycosidases (IC₅₀ = 0,5-38 μ M).¹

This work builds on previous knowledge about the reactivity of isoxazolidine-4,5-diols in nucleophilic additions with vinyl magnesium bromide in the presence of cerium chloride, providing hydroxyaminodiols with excellent syndiastereoselectivity (dr > 95:5).²

The key intermediate, appropriately substituted γ -(hydroxyamino)propane- α,β -diol with terminal C=C double bond, was subjected to N-O bond reduction followed by the substrate-directed epoxidation with aqueous hydrogen peroxide/phosphotungstic acid. The resulting epoxide subsequently reacted in Lewis acid-catalyzed S_N2 intramolecular cyclization, giving the desired pyrrolidine compound with four consecutive stereocenters. Each of the key reactions above proceeded with an excellent diastereoselectivity (dr > 95:5).

Finally, the synthesized racemic pyrrolidine alkaloids I and II were tested for their potential antiproliferative effect on three cancer cell lines U87-MG, HepG2, JEG-3 and on immortalized proximal tubular cells HK2.



Scheme 1. (±)-Codonopsinol B I and its derivative II.

We would like to thank gratefully to the Slovak Agency VEGA (project no. 1/0552/18).

- [1] Tsou, E. L.; Chen, S. Y.; Yang, M. H.; Wang, S. Ch.; Cheng, T. R. R.; Cheng, W. Ch. *Bioorg. Med. Chem.* 16, 10198 (2008).
 [2] Ďurina, L.; Malatinský, T.; Moncol, J.; Záborský, O.; Fischer, R. *Synthesis* 53, 688 (2021).

4Po06

SYNTEZA FUNKCIONALIZOVANÝCH SPIRO[AKRIDIN-9-YL]-TIOMOČOVÍN S METYL-BRÓMACETÁTOM A DIETYL-ACETYLÉNDIKARBOXYLÁTOM

Monika Garberová¹, Mária Vilková¹, Ivan Potočňák¹, Ján Imrich¹

¹Univerzita Pavla Jozefa Šafárika, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Moyzesova 11, 04001 Košice, email: monika.garberova@student.upjs.sk

V posledných rokoch sú 1,3-tiazolidín-4-óny rozsiahlo skúmanými zlúčeninami kvôli ich významnej biologickej aktivite. Deriváty tiazolidinónov majú antibakteriálne, protizápalové, antimikrobiálne, antivírusové, anti-HIV aj protirakovinové vlastnosti [1], ktoré upútali pozornosť chemikov pre výskum tiazolidinónov ako potenciálnych skeletov pre dizajn nových liečiv.

Na základe predošlých výsledkov našej výskumnej skupiny [1, 2] sme sa rozhodli pre pokračovanie v danej problematike. Reakciou akridín-9-karbaldehydu s derivátmi **1a–e** vznikali 3-(akridín-9-yl)-2-kyano-*N*-[(fenylnkarbamotioyl)amino]prop-2-énamidy, ktoré spontánne spirocyklizovali za vzniku produktov **2a–e**. Ich následnými reakciami s metyl 2-bromacetátom (MBA) a dietyl-acetyléndikarboxylátom (DEAD) vznikali 1,3-tiazolidín-4-óny **3 a 4**.

Syntetizované deriváty **2–4** boli podrobené štruktúrnej analýze s využitím metód NMR a X-ray analýzy. Vzhľadom k tomu, že mnoho derivátov akridínu má biologickú aktivitu a niektoré z nich sa uplatňujú už aj v klinickej praxi, aj zlúčeniny **2–4** budú podrobené testovaniu ich biologickej aktivity.

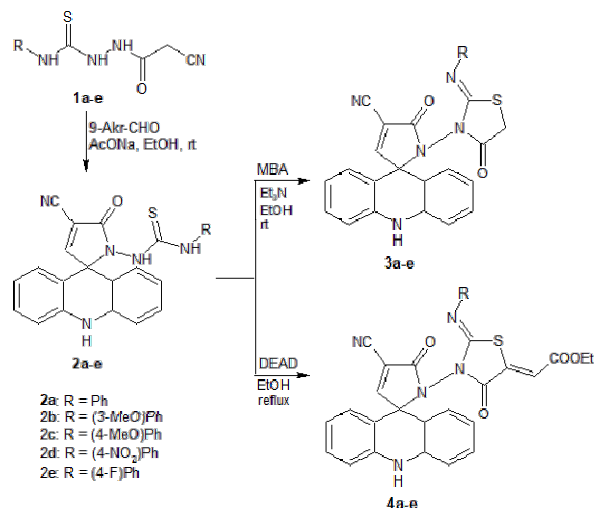


Schéma 1

Táto práca vznikla s finančnou podporou grantu VEGA 1/0148/19.

- [1] Bečka M., Vilková M., Šoral M., Potočňák I., Breza M., Béres T., Imrich J.: *Journal of Molecular Structure*. 1154,152 (2018).
 [2] Vilková M., Šoral M., Bečka M., Potočňák I., Sabolová D., Béres T., Dušek M., Imrich J.: *Magn. Reson. Chem.* 58, 204 (2020).

4Po07

THIOPHENE-LINKED PHTHALOCYANINES AND SUBPHTHALOCYANINES DIRECTLY ON THEIR NUCLEUS.

Mgr. Marcela Gašparová¹, RNDr. Zita Tokárová, PhD.¹, RNDr. Kamil Tokár, PhD.^{2,3}

¹ Department of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, University of Ss. Cyril and Methodius, Nam. J. Herdu 2, 91701, Trnava, Slovakia, maca.gasparova@gmail.com

² Center for Computational Material Science, Institute of Physics, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská Cesta 9, 84511, Bratislava, Slovakia

³ Advanced Technologies Research Institute ATRI, Faculty of Materials Science and Technology in Trnava, Slovak University of Technology, Jana Bottu 8857/ 25, 917 14, Trnava, Slovakia

Abstract: In our research we have focused on a synthesis of phthalocyanines (**Pc**) and subphthalocyanines (**SubPc**) containing thiophene moiety. In newly synthesized **Pc** and **SubPc** analogues, benzene rings are replaced by the thiophene cores. Thiophene was chosen as key structural feature due to its stability and structural planarity that allow to create a strong electronic conjugation in structure. Thiophenes are until now taken as the most valid building blocks in organic electronic materials. Target thiophene-containing **Pc** and **SubPc** (**Figure 1**)

show the possibility of adjusting the properties using small changes in structure. In our case by incorporation of thiophene, physico-chemical (i.e. UV-Vis, fluorescence, solubility) and optoelectronic properties (distribution of electrons on the frontier molecular orbitals) can be modified leading to an enhancement of π -conjugation or spatial distribution. Encouraged by these purposes new synthetic pathways towards thiophene-containing **Pc/SubPc** are currently under our investigation. There are a vast number of research works describing the properties and synthesis of phthalocyanines but subphthalocyanines with thiophene core are rather undiscovered. Our goal was to synthesize phthalocyanine and subphthalocyanine derivatives containing thiophene unit. In such compounds unusual tetravalent sulphur atom (S^{IV}) could be the structural feature of **Pc/SubPc**. The work focused on proper structural identification is under progress until now.

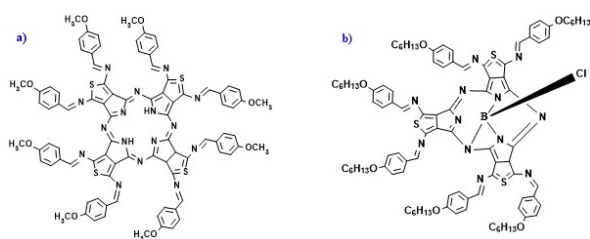


Figure 1 Structure of a) **Pc** and b) **SubPc** containing thiophene.

Acknowledgements

Financial support of the Scientific Grant Agency VEGA 2/0055/21: Study of low molecular π -conjugated thiophene derivatives suitable as organic semiconductors and the Cultural and Educational Grant Agency KEGA 025UCM-4/2021: Introduction of a new professional study program analytical and bioanalytical chemistry at the Faculty of Natural Sciences UCM in Trnava

[1] Sesalan B. Ş., Koca A., Gül A.: *Dyes and Pigments*. 79, 3 (2008).

4Po08

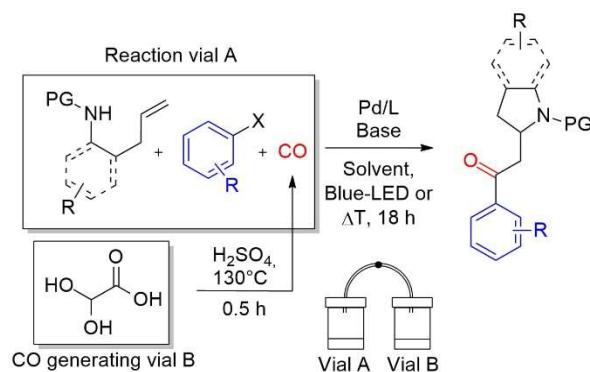
DOMINO CARBONYLATION REACTION IN THE SYNTHESIS OF NITROGEN HETEROCYCLES

Michal Gavenda, Tomáš Vyskočil, Martin Markovič, Peter Kooš, Tibor Gracza

Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava, Slovak Republic, michal.gavenda22@gmail.com

Palladium catalyzed *cross-coupling* reactions have become a very powerful tool in organic synthesis over the last decades. These reactions allow construction of complex organic molecules in only one step under relatively mild conditions. Optimization of the reaction conditions is often necessary due to high number of reaction parameters such as pressure, temperature, load of catalyst system and others.

New reaction conditions for the palladium catalyzed Heck type cyclization associated with the insertion of carbon monoxide have been developed. *N*-Tosyl protected 2-allyl aniline has been used as a model substrate in the cyclization reaction yielding 2-substituted indoline. The reaction has been optimized in the two-chamber system. Glyoxylic acid monohydrate has been used as an *ex-situ* donor of carbon monoxide [1]. Utilization of Blue-LED energy source in proposed synthetic strategy has been also examined. Light promoted reactions proceed via different reaction mechanism, thus allowing difficult transformations which are otherwise not possible at high temperatures and pressures [2]. Moreover, light as a “green” energy source is more suitable for approach to unstable molecules.



The authors gratefully thank the Slovak Grant Agencies (VEGA, project. No. Vega 1/0552/18 and project. No. Vega 1/0766/20).

[1] Markovič, M.; Lopatka, P.; Kooš, P.; Gracza, T. *ChemistrySelect*, 2016, 1, 2454-2457.

[2] a) Torres, G.; Liu, Y.; Arndsten, B. *Science*, 2020,

368, 318–323. b) Gosset, C.; Pellegrini, S.; Jooris, R.; Bousquet, T.; Pelinski, L. *Adv. Synth. Catal.*, **2018**, *360*, 3401–3405.

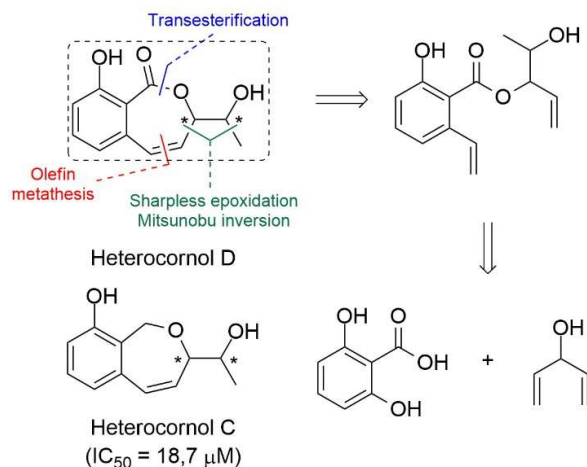
4Po09

THE FIRST TOTAL SYNTHESIS AND ABSOLUTE CONFIGURATION OF HETEROCORNOL D

Ján Gettler, Tomáš Čarný, Martin Markovič, Peter Kooš, Tibor Gracza

Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava, Slovak Republic, jan.gettler@stuba.sk

Heterocornol D was isolated from the fermentation extract of fungus *Pestalotiopsis Heterocornis*, together with twelve previously undescribed derivatives.^[1] Some of these natural compounds have shown antifungal, antibacterial and anticytotoxic activity against various types of human cancer cell lines.^[1] Among these derivatives, heterocornol C has shown the strongest cytotoxic activity against human cancer cell line of lungs (H460). The absolute configuration of a similar natural substance - heterocornol D has not been determined. Also, the total synthesis of this derivative has not been yet accomplished. We proposed a convergent synthesis for the preparation of heterocornol D including transesterification^[2] and olefin metathesis as the key steps. By involving the Sharpless asymmetric epoxidation and Mitsunobu inversion into the reaction sequence, all four stereoisomers of heterocornol D can be easily prepared. Absolute configuration of heterocornol D was determined by comparison of ¹H NMR spectra and specific optical rotations of prepared derivatives to published data.



The authors gratefully thank the Slovak Grant Agencies (APVV, project No. APVV-20-0105; VEGA, project. No. 1/0552/18 and project. No. 1/0766/20)

[1] Lei, H.; Lin, X.; Han, L.; Ma, J.; Dong, K.; Wang, X.; Zhong, J.; Ma, Y.; Liu, Y.; Huang, X.: *Phytochemistry*. **142**, 51 (2017).

[2] Yoshino, T.; Sato, I.; Hiram, M.: *Org. Lett.* **4292**, 14 (2012).

4Po10

THERMAL STABILITY OF PYRIDINE HYDRAZONE PHOTOSWITCHES

Lea Hegedúsová¹, Bernard Mravec¹, Juraj Filo¹, Marek Cigán¹

¹*Katedra organickej chémie, Prírodovedecká fakulta UK, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, hegedusova37@uniba.sk*

Thermal stability, defined as a half-life of back thermal reaction ($\tau_{2/1}$), is one of the most important parameters for a practical application of a molecular photoswitch. Depending on the thermal stability, photochromic molecules (photoswitches) are classified into P-type (long $\tau_{2/1}$) and T-type (short $\tau_{2/1}$).^[1] Hydrazones have become very attractive photoswitches in the last few years due to their simple preparation, easy structural modifiability and high thermal stability of configuration isomers. Moreover, a suitable modification of their structure leads to the desired tunable photochromic properties.^[2]

Herein, we presented a new group of promising P-type photoswitches based on *p*-acceptor substituted 2-benzoylpyridine hydrazone with thermal half-lives up to 280 years.^[3] The increasing electron-acceptor character of the substituent in the hydrazone part of the molecule increases the half-life of back thermal isomerization of a thermodynamically less stable isomer. We have quantified the effect of individual substituents in a series of prepared hydrazones and showed that the rate of back thermal isomerization can be simply predicted based on the electronic parameter of a given substituent. In addition, we have clarified the mechanism of back thermal isomerization using quantum-chemical calculations, which can be classified as complex three-step inversion-rotation reaction mechanism.

Acknowledgement:

We would like to thank to Šimon Budzák, Medved' Miroslav, Lukáš F. Pašteka, Chavdar Slavov, Torben Saßmannshausen and Josef Wachtveitl for co-operation on this work.

We would like to thank to the Slovak Research and Development Agency (APVV-20-0098) for financial support.

[1] van Dijken, D.J.; Kovariček, P.; Ihrig, S. P.; Hecht, S. *J.Am.Chem.Soc.* **2015**, *137*,

14982–14991.

- [2] Shao B., Qian H.; Li, Q., Aprahamian, I.: *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 8364.
- [3] Mravec, B., Budzák, Š., Medved' M., Pašteka, L.F., Slavov, Ch., Saßmannshausen, T., Wachtveil, J., Kožíšek J., Hegedüsová L., Filo J., Cigán, M. *J. Org. Chem.*, submitted manuscript.

4Po11

NOVEL HAMAMELITANNIN ANALOGUES: ANTIOXIDANT AND ANTI-BIOFILM ACTIVITY

Jana Hricoviniová¹, Šárka Pospíšilová², Josef Jampílek^{2,3} and Zuzana Hricoviniová⁴

¹Cancer Research Institute, Biomedical Research Center, Slovak Academy of Sciences, 845 05 Bratislava, Slovak Republic

²Division of Biologically Active Complexes and Molecular Magnets, Regional Centre of Advanced Technologies and Materials, Faculty of Science, Palacký University, 783 71 Olomouc, Czech Republic

³Department of Analytical Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, 842 15 Bratislava, Slovak Republic

⁴Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, 845 38 Bratislava, Slovak Republic, chemhric@savba.sk

Nature has been a source of inspiration for the development of new pharmaceutically active agents. Gallotannins (GTs) from various species have been extensively studied as they exhibit multiple biological activities [1]. Moreover, numerous plant polyphenols exhibited strong antibacterial and anti-biofilm activity against staphylococci [2]. Among the staphylococci, *Staphylococcus aureus* is of most clinical concern. Undesirable bacterial *S. aureus* biofilm layers are formed on indwelling medical devices or food processing contact-surfaces, resulting in microbial community more resistant to the traditional disinfectants [3].

A series of new unnatural GTs derived from branched-chain D-lyxose, D-ribose, L-rhamnose, D-mannose and D-fructose were synthesized in order to study their antioxidant and anti-biofilm effects. The antioxidant activity was evaluated by DPPH and FRAP assay. Antibiofilm activity of compounds was tested *in vitro* against *S. aureus*. Experimental data revealed that studied GTs are excellent antioxidants and radical-scavenging agents. All the investigated compounds proved to be potent inhibitors and disruptors of *S. aureus* biofilms at concentrations much lower than the MIC values. Overall, these findings suggest that synthetic GTs could be considered as promising candidates for pharmacological, biomedical,

consumer products, and food industry applications.

This work was financially supported by Slovak grant agency VEGA 2/0022/18 and by the Slovak Research and Development Agency APVV-17-0373.

- [1] Chung K.T., Wong, T.Y., et al. *Critical Reviews in Food Science and Nutrition*, **38**, 421 (1998).
- [2] Takó M., Kerekes E.B., Zambrano C., et al. *Antioxidants*, **9**, 165 (2020).
- [3] Zheng Y., He L., Asiamah T.K., Otto M. *Environm. Microbiol.* **20**, 3141 (2018).

4Po12

VIDITEĽNÝM SVETLOM INICIOVANÝ KROS-KAPLING KATRITZKÉHO SOLÍ A NITROSTYRÉNOV

Michaela Marčeková¹, Branislav Ferko¹, Katarína Ráchel Detková¹, Dušan Berkeš¹ a Pavol Jakubec¹

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

Kros-kaplingové reakcie sa považujú za jeden z najspôhlivejších a najrozšírenejších spôsobov tvorby novej väzby v organickej chémii. Medzi najobľúbenejšie radíme Stilleho, Suzukiho alebo Heckovu reakciu, ktoré sú katalyzované prechodnými kovmi. Nedávno vývoj nových transformáciurýchlila aplikácia netradičných kaplingových partnerov a tiež pokrok vo fotoredoxnej katalýze a elektrochémi. Mnohé novodobé kros-kaplingy využívajú nitrozluččeniny, obzvlášť β -nitrostyrény.[1] Tie sú zvyčajne stabilné tuhé látky, ktoré sú dostupné nielen viacerými syntetickými cestami ako Henryho reakciou, ale aj komerčne. Od objavu Seebacha a Russella pravažná väčšina denitračných reakcií podlieha adično-elimináčnemu mechanizmu.[2]

Na základe vytvoreného predpokladu o využití radikálov v denitračných kaplingov boli v našej práci ako kaplingoví partneri navrhnuté Katritzkého soli. Vďaka ich schopnosti tvoriť EDA komplexpri laboratórnej teplote slúžia ako zdroj radikálu aj bez prítomnosti katalyzátora. Rozsiahly skrining reakčných podmienok započal reakciou *p*-metoxynitrostyrénu s benzylickou Katritzkého soľou, aby sa v základných podmienkach zabránilo nežiadúcej polymerizácii. Následne po mnohých experimentoch boli stanovené najvhodnejšie reakčné podmienky (Schéma 1).

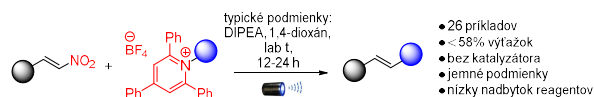


Schéma 1: Denitračný kros-kapling nitrostyrénov

Objavený denitračný kros-kapling toleruje viacero funkčných skupín a bol úspešne prevedený s Katritzského soľami obsahujúce benzylické substituenty nesúce bróm alebo trifluórmetylovú skupinu v rôznych pozíciách. Rovnako úspešné boli rôzne cyklické a heterocyklické soli, substráty nesúce primárnu alebo sekundárnu hydroxylovú skupinu a deriváty aminokyselín. Aromatické nitrostyrény s rozmanitými substituentami (metoxy, bróm, jód a metyl) a tiež funkcionalizovaný heteroaromát úspešne podstúpili denitračný kros-kapling.[3]

Práca vznikla za podpory Vedeckej grantovej agentúry MŠVVaŠ a SAV a Agentúry na podporu výskumu a vývoja (zmluva č.VEGA 1/0489/19 a APVV-20-0298) a grantu v rámci Programu na podporu mladých výskumných pracovníkov na STU v Bratislave.

- [1] Marčeková M., Ferko B., Detková K. R., Jakubec, P.: *Molecules*.25 (15), 3390 (2020).
- [2] Seebach, D., Schäfer, H., Schmidt, B.; Schreiber, M. *Angew. Chem. Int. Ed.* 31, 1587-1588 (1992).
- [3] Ferko B., Marčeková M., Detková K. R., Doháňošová J., Berkeš D., Jakubec, P.: *Odoslané do tlače.* (2021).

4Po13

SYNTHESIS, SOLUBILITY INCREASE AND BIOLOGICAL ACTIVITY OF PURINE DERIVATIVES FOR BIOTECHNOLOGICAL APPLICATION

Dardan Klos¹, Lucie Plíhalová^{1,2}, Marel Zatloukal¹, Karel Doležal¹

¹Department of Chemical Biology, Faculty of Science, Palacký University, Šlechtitelů 27, CZ-783 71, Olomouc, Czech Republic.

²Laboratory of Growth Regulators, Faculty of Science, Palacký University & Institute of Experimental Botany ASCR, Šlechtitelů 27, CZ-783 71, Olomouc, Czech Republic.
E-mail: dardan.klos@upol.cz

Cytokinins are compounds of natural origin ranked amongst phytohormones, which possess dozens of effects on plants, such as delay of leaf senescence, cell division, growth of distinct plant segments, plants response to biotic and abiotic stress and many more [1]. They have impact even on animal cells, thus their derivatives are used in cosmetics for their affirmative effects on human skin cells [2]. It is well known, that aromatic cytokinins are practically insoluble in most

common solvents. Very important is solubility in water, which can lead us to improved usage in biotechnology [3].

Objective of this study was not only to increase water solubility of six different cytokinins, but also characterise them by available physico-chemical methods. Improved solubility of selected substances was achieved by the protonization of free bases by three various acids. Furthermore few of newly synthesized compounds were crystallized and their chemical structure with monocrystal diffraction was observed.

Finally substances were tested for biological activity in classic bioassays such as wheat leaf senescence, callus, AHK3 receptor bioassay and also in field experiment. In which the effect of newly synthesized compounds was tested on spring barley.

- [1] Davies, P. J. (2010). "The plant hormones: their nature, occurrence, and functions," in *Plant hormones*. Ed. Davies P. J, 1–15
- [2] S.I.S. Rattan, B.F.C. Clark, *Kinetin delays the onset of ageing characteristics in human fibroblasts*, *Biochemical and Biophysical Research Communications*, 201 (1994), pp. 665–672.
- [3] Mok, David, W. S. (1994). *Machteld C Cytokinins : chemistry, activity, and function*. CRC Press, Boca Raton, Fla, 218.

4Po14

SYNTHESIS OF NON-SYMMETRICAL MONOQUATERNARY AMMONIUM SALTS AS POTENTIAL REACTIVATORS OF INHIBITED CHOLINESTERASES

Zuzana Kohoutova¹, David Malinak^{1,2}, Tereza Hofmanova¹, Rudolf Andrys¹, Jana Svobodova¹, Kamil Musilek^{1,2}

¹University of Hradec Kralove, Faculty of Science, Rokitanskeho 62, 500 03 Hradec Kralove, Czech Republic, zuzana.kohoutova@uhk.cz

²University Hospital Hradec Kralove, Biomedical Research Centre, Sokolska 581, 500 05 Hradec Kralove, Czech Republic

Organophosphates (OP) are nerve agents (NA) causing cholinergic crisis and in severe poisoning even death. They are irreversible inhibitors of cholinesterases (ChEs), namely Acetylcholinesterase (AChE) and Butyrylcholinesterase (BChE) [1]. While inhibition of AChE can be life threatening, inhibition of BChE has no adverse effects therefore it can be used as pseudo-catalytic bioscavenger. However, BChE itself does not show catalytic activity, it remains

inhibited by OP. BChE detoxifies OP by making a covalent bond with it [2]. Reactivators of AChE are already widely used but they have difficulties to pass the blood-brain barrier (BBB) due to their double-charged structure. The downsides to commercially used reactivators are not only their difficulties to pass the BBB but also the fact that they are not broad-spectrum reactivators. That is why nowadays the research is shifting its focus to reactivators of BChE as well [3]. The novel reactivators K027, K048 and K203 give promising results. The aim of this research is synthesis of monoquaternary compounds derived from compound K203 and subsequent observation of the effect of charge on physicochemical properties of substances and on biological activity.

This work was supported by the Czech Science Foundation (No. GA21-03000S) and the University of Hradec Kralove (No. SV2104-2021).

- [1] Zorbaz T., Malinak D., Kuca K., Musilek K., Kovarik Z.: *Chem.-Biol. Interact.* 307,16 (2019).
- [2] Goldsmith M., Ashani Y.: *Chem.-Biol. Interact.* 292, 50 (2018).
- [3] Worek F., Thiermann H.: *Pharmacol Ther.* 139, 249 (2013).

4Po15

UNIVERSAL STRATEGY FOR THE POLYKETIDE SYNTHESIS. TOTAL SYNTHESIS OF AGROPYRENOL, SORDARIAL, AND HETEROCORNOL A AND B

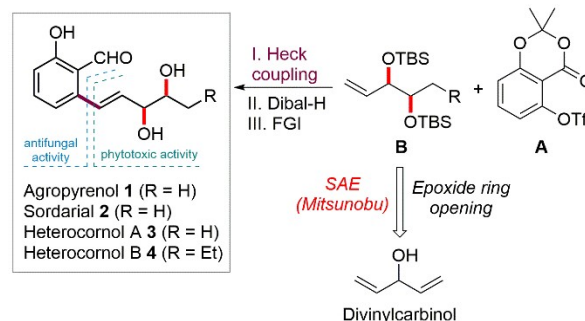
Martin Markovič,¹ Peter Kooš,¹ Saskia Sokoliová,¹ Nikola Boháčiková,¹ Tomáš Vyskočil,¹ Ján Moncol² and Tibor Gracza¹

¹*Institute of Organic Chemistry and Petrochemistry,*
²*Institute of Inorganic Chemistry, Technology and Materials, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK-812 37, Bratislava, Slovakia, peter.koos@stuba.sk*

Agropyrenol **1**, sordarial **2**, heterocornol A **3** and B **4** belong to a series of polyketide derivatives isolated from natural sources. [1] Many of these natural fungal metabolites were evaluated for their phytotoxic, cytotoxic, antibacterial, and immunosuppressive activities. Among these compounds, substituted salicylic aldehydes **1** and **2** have been proven to be phytotoxic [2] and immunosuppressive, [3] respectively.

The total synthesis and absolute configuration assignment of agropyrenol **1**, sordarial **2**, heterocornol A **3** and B **4** has been achieved. All stereoisomers of these natural polyketides were

prepared by asymmetric synthesis starting from divinylcarbinol. The absolute and relative configurations of all isomers were assigned by single-crystal X-ray analysis. The absolute configuration of these natural products has been confirmed.



Scheme 1. Proposed synthesis of natural polyketides.

The authors gratefully thank the Slovak Grant Agencies (APVV, project No. APVV-20-0105; VEGA, project. No. 1/0552/18 and project. No. 1/0766/20)

- [1] Wang J., Wei X., Lu X., Xu F., Wan J., Lin X., Zhou X., Liao Sh., Yang B., Tu Zh., Liu Y.: *Tetrahedron* 70, 9695, (2014).
- [2] Andolfi A., Cimmino A., Vurro M., Berestetskiy A., Troise C., Zonno M. Ch., Motta A., Evidente A.: *Phytochemistry* 79, 102, (2012).
- [3] Cimmino A., Zonno M. Ch., Andolfi A., Troise C., Motta A., Vurro M., Evidente A.: *J. Agric. Food. Chem.* 61, 1779,(2013).

4Po16

SYNTÉZA A HODNOCENÍ ANALOG N-[3,5-BIS(TRIFLUORMETHYL)FENYL]-5-BROM-2-HYDROXYBENZAMIDU ÚČINNÝCH PROTI METHICILIN-REZISTENTNÍM STAFYLOKOKŮM

Martin Krátký¹, Karolína Dlasková Jaklová², Klára Konečná¹, Jana Maixnerová¹, Jarmila Vinšová¹

¹*Univerzita Karlova, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Akademiya Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, martin.kratky@faf.cuni.cz*

²*Orlen UniCRE a.s., Areál Chempark, Záluží 1, 436 70 Litvínov*

Nárůst lékové rezistence představuje závažný celosvětový problém. Příkladem takového problematického patogenu je methicilin-rezistentní *Staphylococcus aureus* (MRSA), který je zodpovědný za celou řadu infekcí – od kožních a ranných infekcí po život ohrožující pneumonie a infekce krevního řečiště [1].

N-[3,5-Bis(trifluormethyl)fenyl]-5-brom-2-hydroxybenzamid a jeho deriváty jsme původně připravili a studovali jako inhibitory cholinesteráz [2], posléze byla zjištěna i jejich antimikrobní aktivita. Syntetizovali jsme polohové isomery

titulní sloučeniny, její *N*-alkyl (*n*-C₁-C₁₂) karbamáty, *N,N*-disubstituované karbamáty a thiokarbamáty. Anilidy byly připraveny mikrovlnnou syntézou z halogenovaných hydroxybenzoových kyselin a aminů pomocí PCl₃. *N*-Monosubstituované karbamáty byly získány z hydroxybenzamidů a isokyanátů v přítomnosti terciární báze a *N,N*-disubstituované (thio)karbamáty jsme syntetizovali z příslušných komerčně dostupných (thio)karbamoyl chloridů v bazickém prostředí. Na základě konceptu isosterie jsme také nahradili amidovou vazbu iminem či močovinou.

Připravené deriváty byly hodnoceny *in vitro* vůči patogenním houbám, Gram-pozitivním a Gram-negativním bakteriím. Některé sloučeniny vykazaly vysokou účinnost proti všem testovaným Gram-pozitivním kmenům včetně MRSA. Nejúčinnější byly *N*-monosubstituované karbamáty s kratším alkylem (do C₆), *N,N*-diallylkarbamát a *N,N*-dimethylthiokarbamát (minimální inhibiční koncentrace od 0,98 μM včetně MRSA). Tyto molekuly jsou aktivnější než výchozí hydroxybenzamid a některé z nich jsou zároveň netoxické pro savčí buňky (linie HepG2).

Tato práce byla podpořena projekty Grantové agentury ČR, reg. č. 20-19638Y, Ministerstva zdravotnictví ČR, reg. č. NU21-05-00482, a EFSA-CDN (reg. č. CZ.02.1.01/0.0/0.0/16_019/0000841) spolufinancovaného Evropskou unií.

- [1] Zhen X., Lundborg CS., Zhang M., Sun X., Li Y., Hu X., Gu S., Gu Y., Wei J., Dong H.: *Sci. Rep.* 10, 3900 (2020).
 [2] Krátký M., Jaklová K., Štěpánková Š., Svrčková K., Pflégr V., Vinšová J.: *Curr. Topics Med. Chem.* 20, 2094 (2020).

4Po17

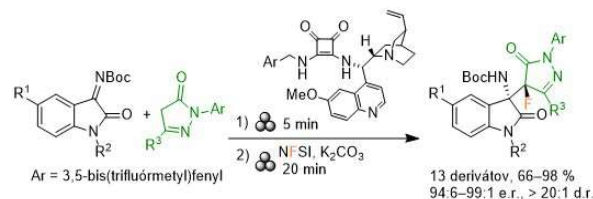
ORGANOKATALYTICKÁ DOMINO MANNICHOVA REAKCIA/ FLUORÁCIA V PODMIENKACH MECHANICKEJ AKTIVÁCIE V GUĽOVOM MLYNE

Dominika Krištofiková¹, Mária Mečiarová¹, Radovan Šebesta¹

¹Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra organickej chémie, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava 4, Slovenská republika; kristofiko11@uniba.sk

Domino Mannichova reakcia s následnou α-fluoráciou je diastereoselektívna metóda na prípravu chirálnych heterocyklických zlúčenín obsahujúcich dve nové kvartérne stereogénne centrá (obr.1) [1]. Prvým krokom je adícia

enolizovateľných pyrazolónov na *N*-chránené imíny odvodené od izatínu katalyzovaná chirálnym bifunkčným skvaramidovým katalyzátorom. Následnou reakciou s elektrofilným fluoračným činidlom sa získali produkty vo vysokých výťažkoch (do 98 %) a enantiomérnych pomeroch (do 99:1). [2] Vysokú diastereoselektivitu druhého reakčného kroku sme vysvetlili DFT výpočtami. Reakcie prebiehali v podmienkach mechanickej aktivácie v guľovom mlyne.



Obr.1 Príprava fluórovaných adičných produktov domino reakciou.

Za finančnú podporu ďakujeme grantu VEGA 1/0332/19 a Grantu UK 18/2021.

- [1] Bao X., Wang B., Cui L., Zhu G., He Y., Qu J., Song Y.: *Org. Lett.* 17, 5168 (2015).
 [2] Krištofiková D., Mečiarová M., Rakovský E., Šebesta R.: *ACS Sustain. Chem. Eng.* 8, 14417 (2020).

4Po18

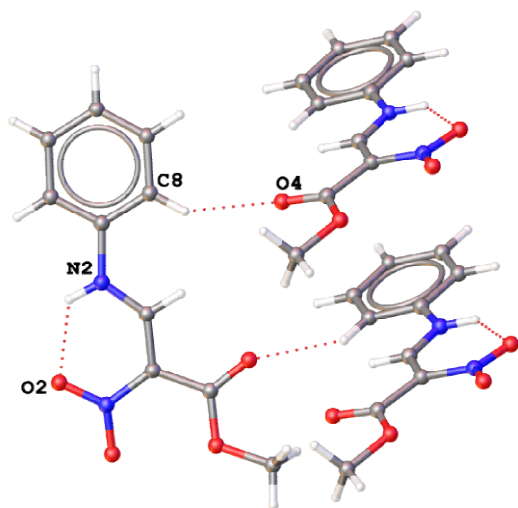
CRYSTAL STRUCTURE OF METHYL (Z)-2-NITRO-3-(PHENYLAMINO)ACRYLATE (1) AND (E)-3-OXO-2-((PHENYLAMINO)METHYLENE)BUTANE NITRILE (2)

Ján Lokaj¹, Viktor Milata¹, Ján Moncol¹, Branislav Pavilek¹

Faculty of Food and Chemical Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava

Chemistry of 3-oxobutoates is extremely deeply studied due to its synthetic potential to acyclic or cyclic, aliphatic or (hetero) aromatic derivatives. On the other hand the 3-oxobutanenitrile chemistry started to study the exploitation 3-oxo-2-ethoxymethylenebutanenitrile in organic synthesis. The compound(1) is a starting product for the synthesis of 4-amino-3-acetylquinoline – compounds which induce apoptosis (1). Trisubstituted push-pull nitro alkenes are interesting and powerfull intermediates in the synthesis of variously substituted heterocycles(2). Non-equivalently β,β-substituted aminiloethylenes could form hydrogen bond of the imino hydrogen with the rest of the substituent(s) in β-position. Thus, 2-acetyl-3-

(phenylamino)acrylate prefer the intramolecular hydrogen bond of the imino-hydrogen with the oxygen atom of the carbonyl group(3) over to oxygen of the carbonyl group of the alkoxy-carbonyl group. The compound (1) crystallizes in orthorhombic system with space group $P212121$. The second compound (2) crystallizes in monoclinic system with space groups $P21/n$. Both compounds are planar and their molecular structure shows intramolecular $N-H\cdots O$ hydrogen bond with nitrogen atoms as donor and oxygen atoms as acceptor through nitro group (1) or ketone group (2). The crystal structure of both cases show stacked molecules through $\pi-\pi$ stacking interactions. The crystal structure of both compounds shows 3D supramolecular network forming through weak $C-H\cdots O$ and $C-H\cdots N$ (only 2) hydrogen-bonding interactions.



Obr. 1 H-bonds in compound 1

This work was financially supported by Science and Technology Assistance Agency under contract No. APVV-17-0513

- [1] (Repický A., Jantová S., Theiszová M., Milata V.: Cytotoxicity and induction of apoptosis by 4-amino-3-acetylquinoline in Murine Leukemia cell line L1210. Biomed. Pap. Med. Fac. Univ. Palacky, Olomouc, Czech. Rep., 49 (2), 345-347, 2005.).
- [2] Pavílek B., Milata V.: Arkivoc 2020, 401-423, DOI: <https://doi.org/10.24820/ark.5550190.p011.495>
- [3] (Couchouron B., Le Saint J., Courtot P.: Bull.Soc.Chim.Fr. II(3-4), 66 (1983).

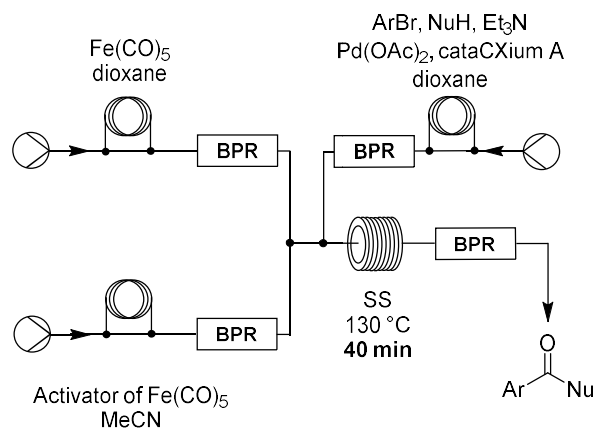
4Po19 ACCELERATING CO GAS-FREE CARBONYLATION OF ARYL BROMIDES IN CONTINUOUS FLOW SYSTEM

Pavol Lopatka¹, Martin Markovič¹, Peter Kooš¹, Tibor Gracza¹

¹Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava, Slovak Republic, pavollopotka@stuba.sk

Over the past decade, continuous-flow reactors have emerged as a powerful tool for accelerated studies of gas-liquid reactions, offering effective mixing, high interfacial area and excellent mass transfer [1]. The use of gaseous reagents, including CO, in flow chemistry is well established. Small volume of the reactor allows to operate at high pressure in safety regime. In order to avoid handling the gas cylinder, the use of CO surrogates is preferred.

In this manner, we developed the continuous-flow protocol utilizing iron pentacarbonyl as *in situ* donor of CO for Pd-catalysed carbonylations of aryl bromides. The optimization of temperature, pressure, catalyst and ligand loading, and residence time resulted in process-intensified flow conditions for the transformation. By using a improved conditions for the activation of iron pentacarbonyl, we are able to avoid complications associated with the use of this CO surrogate in the carbonylations of aryl halides [2]. A variety of aryl bromides were converted to their corresponding amides and esters in good-to-excellent yields using near stoichiometric amount of CO. In addition, a key advantage of investigating the reaction in flow is the ability to significantly reduce residence time to 40 min in comparison to similar batch processes (15-22 h) [3].



Scheme: Pd-catalysed carbonylations in continuous flow system.

The authors thank the Slovak Grand Agencies (VEGA No. 1/0766/20, VEGA No. 1/0552/18 and APVV-20-0105) for financial support.

- [1] C. J. Mallia, I. R. Baxendale, *Org. Process Res. Dev.* **2016**, *20*, 327-360.
 [2] M. Babjak, O. Caletková, D. Ďurišová, T. Gracza, *Synlett* **2014**, *25*, 2579-2584.
 [3] H. Konihi, K. Manabe, *Tetrahedron Letters* **2019**, *60*, 151147.

4Po20

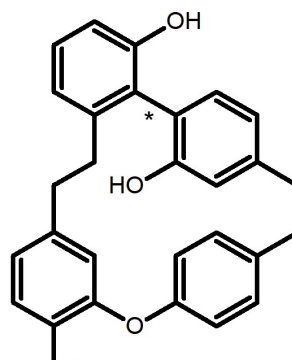
IZOLÁCIA CYKLOFÁNOV Z PEČEŇOVKY *MARCHANTIA POLYMORPHA*

Miloš Lukáč¹, Mário Markuliak¹, Branislav Horváth²

¹Farmaceutická fakulta UK v Bratislave. Katedra chemickej teórie liečiv, Kalinčiakova 8, 83232 Bratislava, markuliak1@uniba.sk

²Farmaceutická fakulta UK v Bratislave. Centrálné laboratórium NMR, Odbojárov 10, 83232 Bratislava

Porastnica mnohotvará je jednou z najbežnejších pečeneviek vyskytujúcich sa na našom území. Na Slovensku sa vyskytujú tri podrodruhy *Marchantia polymorpha* subsp. *montivagans*, *Marchantia polymorpha* subsp. *polymorpha* a *Marchantia polymorpha* subsp. *runderalis*. Ide o machorast s nápadnou lupeňovitou stielkou, ktorá je zaujímavá nielen svojím tvarom, ale aj obsahovými zlúčeninami. Je najbežnejším prírodným zdrojom bisbibenzyllov. Ide o cyklofány, makrocyclické zlúčeniny so štyrmi aromatickými jadrami. Najčastejšie sa vyskytujúcim bisbibenzylom je marchantín A [1,2]. Nám sa podarilo izolovať zo stielky *Marchantia polymorpha* subsp. *polymorpha* izorikardín C a rikardín C. Zlúčeniny sú skôr typické pre rody *Plagiochasma* a *Reboulia* a v európskej porastnici mnohotvarej doposiaľ neboli zistené. Izolácia bola uskutočnená maceráciou stielok v metanole a purifikáciou extraktu kolónovou chromatografiou na hydrofilných stacionárnych fázach: silikagél a diolom modifikovaný silikagél. Izorikardín C (Obr. 1), ako majoritný cyklofán, predstavuje zaujímavú zlúčeninu s axiálnou chiralitou, ktorá bola len v nedávnej dobe synteticky pripravená atroposelektívnou syntézou [3].



Obr. 1 Štruktúra izorikardínu C

Práca vznikla za podpory grantov VEGA 1/0054/19 a APVV-17-0373.

- [1] Asakawa Y., Toyota M., Tori M., Hashimoto T.: *Spectroscopy* **14** 149 (2000).
 [2] Varényi S., Chrenová S. Lukáč M.: *Chem. Listy* **113**, 53 (2019).
 [3] Marx L., Lamberty D., Choppin S., Colobert F., Speicher A.: *Eur. J. Org. Chem.* **2021**, 1351 (2021).

4Po21

IMIDAZO[1,2-C]PYRIMIDIN-5(6H)-ONE INHIBITORS OF CDK2: SYNTHESIS, KINASE INHIBITION AND CO-CRYSTAL STRUCTURE

Josef Jansa¹, Radek Jorda², Jana Škerlová³, Petr Pacht³, Miroslav Peřina², Eva Řezníčková², Tomáš Heger², Tomáš Gucký², Pavlína Řezáčová^{3,4}, Antonín Lyčka^{1,5}, Vladimír Kryštof²

¹ Research Institute for Organic Syntheses (VUOS), Rybitví 296, 53354, Pardubice-Rybitví, Czech Republic, antonin.lycka@vuos.com

² Department of Experimental Biology, Faculty of Science, Palacký University, Šlechtitelů 27, 78371, Olomouc, Czech Republic

³ Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, The Czech Academy of Sciences, Flemingovo nám. 2, 16610, Prague 6, Czech Republic

⁴ Institute of Molecular Genetics, The Czech Academy of Sciences, Videňská 1083, 14220, Prague, Czech Republic

⁵ Faculty of Science, University of Hradec Králové, Rokytanského 62, 50003, Hradec Králové, Czech Republic

We recently identified substituted imidazo[1,2-c]pyrimidin-5(6H)-ones as inhibitors of cyclin-dependent kinase 2 (CDK2). We report the synthesis of derivatives modified at positions 2, 3, 6 or 8 prepared using Suzuki-Miyaura cross-coupling, halogenation, Dimroth-type rearrangement and alkylation as the main synthetic methods [1].

The compounds displayed micro- to submicromolar inhibition of CDK2/cyclin E activity. Binding of the most potent compound **3b** (8-cyclohexylimidazo[1,2-c]pyrimidin-5(6H)-one) to CDK2 was determined using isothermal titration calorimetry. The co-crystal structure of **3b** in complex with fully active CDK2 was solved, revealing the binding mode of **3b** in the ATP pocket and a hydrogen bonding interaction with hinge region residue Leu83. Evaluation against leukaemia cell lines revealed low cytotoxicity, which is in line with the high selectivity towards CDK2 [1].

This study demonstrates that substituted imidazo[1,2-c]pyrimidines can be exploited for future kinase inhibitor development.

Acknowledgement: The authors thank the Czech Science Foundation for financial support (Grant No 19-08410S).

- [1] Jansa J., Jorda R., Škerlová J., Pachel P., Peřina M., Řezníčková E., Heger T., Gucký T., Řezáčová P., Lyčka A., Kryštof V.: *Eur. J. Med. Chem.* **216**, 113309 (2021).

4Po22

SYNTHESIS OF NOVEL ANTIBIOTIC ANALOGUES DERIVED FROM BERKELEYLACTONE A

Tomáš Malatinský¹, Dominika Valachová¹, David Scherhauer¹, Olga Caletková¹, Dušan Berkeš¹, Petra Olejníková¹, Pavol Jakubec¹

¹Faculty of Chemical and Food Technology STU in Bratislava, Radlinského 9, 812 37, Bratislava
tomas.malatinsky@gmail.com

In recent years, the widespread use of antibiotics has led to their benefits being substantially reduced due to the rapid emergence and transmission of antibiotic-resistant strains. Berkeleylactone A is a 16-membered macrolactone (Figure 1), that was isolated as one of metabolites of fungal coculture from surface water of Berkeley pit lake and showed the most potent antibacterial activity, especially against several methicillin-resistant *Staphylococcus aureus* (MRSA) strains.¹ Owing to this valuable antibacterial activity, attractive molecular structure, and lack of an existing synthetic strategies led us to design and realize a concise and convergent total synthesis of berkeleylactone A.²

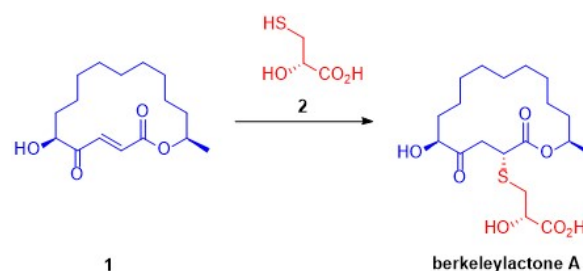


Fig. 1 Sulfa-Michael addition as the last step of berkeleylactone A synthesis.

As a next goal, we decided to develop new, more effective, and readily available analogues of the natural berkeleylactone A and to obtain knowledge about the mechanism of action of this potent antibiotic. It was necessary to prepare several derivatives of berkeleylactone A, which were tested against selected strains with the aim to simplify the structure while maintaining high biological activity. At the beginning, we have chosen two different approaches to the modification of original scaffold, one is based on modification of S-nucleophile (red) while another is based on simplification and modification of macrocycle (blue). Obtained results will be presented.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under contract number No. APVV-20-0298 and by the Research Agency under contract No. VEGA1-0489-19.

- [1] Stierle, A. A.; Stierle, D. B.; Decato, D.; Priestley, N. D.; Alverson, J. B.; Hoody, J.; McGrath, K.; Klepacki, D.: *J. Nat. Prod.* **2018**, *80*, 1150–1160.
[2] Ferko, B.; Zeman, M.; Formica, M.; Veselý, S.; Doháňošová, J.; Moncol, J.; Olejníková, P.; Berkeš, D.; Jakubec, P.; Dixon, D. J.; Caletková O.: *J. Org. Chem.* **2019**, *84*, 7159–7165.

4Po23

SYNTHESIS OF SELECTED AMINOPHENOLIC CONJUGATES FOR THE PURPOSES OF RESEARCHING THEIR TOXICITY

David Malinák¹, Tomas Rousar², Petr Ceslá², Jana Váňová², Nicola Cmuntova¹, Rudolf Andrys¹, Kamil Musilek¹

¹University of Hradec Kralove, Faculty of Science, Rokitanskeho 62, 500 03 Hradec Kralove, Czech Republic, david.malinak@uhk.cz

²University of Pardubice, Faculty of Chemical Technology, Studentska 573, 532 10 Pardubice, Czech Republic

Biotransformation of most of xenobiotics is ensured also through conjugation with glutathione (glutathionylation), and this conjugation has been

considered as detoxification pathway generally. However, there have been described some reactions leading to bioactivation and to enhancement of toxicity in comparison with parent compounds [1]. In addition, our scientific reports have provided some interesting findings on glutathione conjugates inducing toxicity [2]. *N*-acetyl-*p*-aminophenol (paracetamol; APAP) possesses strong antipyretic and analgesic effects but its toxicity at therapeutic doses seems to be negligible in comparison with 4-aminophenol (*p*-aminophenol, PAP). The metabolism of APAP is principally very similar with PAP because, at supratherapeutic doses, it is oxidized to *N*-acetyl-*p*-benzoquinone imine that reacts with glutathione forming acetaminophen-S-glutathione conjugate (APAP-SG). This conjugate has been considered as generally non-toxic agent. On the other hand, some papers showed that APAP-SG might possess some toxic effects [3]. The aim of our work is to synthesize and to purify selected aminophenolic conjugates, to characterize their likely toxic effect in detail and to describe their toxicity *in vitro*.

This work was supported by the Czech Science Foundation (No. GA19-11867S).

- [1] Dekant W.: *Toxicol. Lett.* 124, 21 (2001).
 [2] Rousar T., Parik P., Kucera O., Bartos M., Cervinkova Z.: *Physiol. Res.* 59, 225 (2010).
 [3] Nydlova E., Vrbova M., Cesla P., Jankovicova B., Ventura K., Rousar T.: *J. Appl. Toxicol.* 34, 968 (2014).

4Po24 THE SYNTHESIS OF PYRROLOPHENANTHRIDIN-7-ONE ALKALOIDS BY TANDEM PD⁰- CATALYZED AMINOCARBONYLATION AND C(SP²)-H ACTIVATION

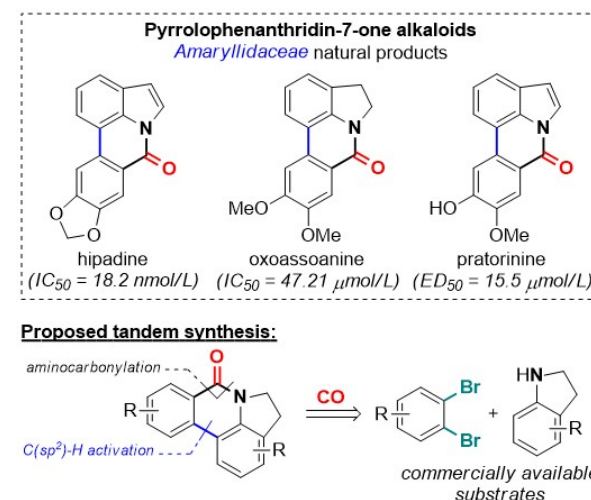
Tomáš Čarný, Martin Markovič, Peter Kooš, Tibor Gracza

Slovak University of Technology, Institute of Organic Chemistry and Petrochemistry, Radlinského 9, SK-812 37, Bratislava, Slovakia
 tomas.carny@stuba.sk

Pyrrorlophenanthridin-7-one alkaloids are tetracyclic, aromatic natural products. One of the derivatives – lycorine, was isolated for the first time in 1966 from *Amaryllidaceae* species.^[1a] Many of these compounds are known mostly for their high cytotoxic activities against various types of tumor cells.^[1b-d] In the past few decades, the synthesis of pyrrorlophenanthridin-7-one alkaloids was mostly focused on a metal

catalyzed cross-coupling reactions, such as intramolecular C-C cross-couplings with C-H activation,^[2a] Suzuki C-C cross-couplings^[2b] and intramolecular Pd-catalyzed aminocarbonylations.^[2c]

Based on our previous project in the synthesis of isoindoloindol-6-one derivatives by tandem aminocarbonylation and C(sp²)-H activation,^[3] we designed a new efficient synthetic strategy for the synthesis of pyrrorlophenanthridin-7-one alkaloids. The aim of the project was synthesis of the desired products by tandem aminocarbonylation and C(sp²)-H activation from commercially available starting materials (indolines and various substituted 1,2-dibromobenzenes). At first, we have optimized reaction conditions for the C-H activation step of the proposed tandem methodology, with 64 % yield of the desired product. Our next goal is to modify optimized conditions for the tandem aminocarbonylation (*Scheme 1*).



Scheme 1. Pyrrorlophenanthridin-7-ones and proposed tandem aminocarbonylation with C(sp²)-H activation.

This work was financially supported by grant agencies VEGA 1/0552/18, VEGA 1/0766/20 and APVV-20-0105.

- [1] a) Rangaswami S.: *Colloq. Int. C. N. R. S.* 114, 89 (1966); b) Sun Q., Shen Y.-H., Tian J.-M., Tang J., Su J., Liu R.-H., Li H.-L., Xu X.-K., Zhang W.-D.: *Chem. Biodiv.* 6, 1755 (2009); c) López S., Bastida J., Viladomat F., Codina C.: *Life Sci.* 71, 2521 – 2529 (2002); d) Min B. S., Gao J. J., Nakamura N., Kim Y. H., Hattori M.: *Chem. Pharm. Bull.* 49, 1217 – 1219 (2001).
 [2] a) Black D. S. C., Keller P. A., Kumar N.: *Tetrahedron Lett.* 30, 5807 – 5808 (1989); b) Mentzel U. V., Tanner D., Tønder J. E.: *J. Org. Chem.* 71, 5807 – 5810 (2016); c) Liang Z., Zhang J., Liu Z., Wang K., Zhang Y.: *Tetrahedron.* 69, 6519 – 6526 (2013).
 [3] Čarný T., Markovič M., Gracza T., Kooš P.: *J.*

Org. Chem. 84, 12499 – 12507 (2019).

4Po25

PRÍPRAVA IZOPEROTETÍNU A

Mário Markuliak¹, Miloš Lukáč¹, Branislav Horváth²

¹Farmaceutická fakulta UK v Bratislave. Katedra chemickej teórie liečiv, Kalinčiakova 8, 83232 Bratislava, markuliak1@uniba.sk

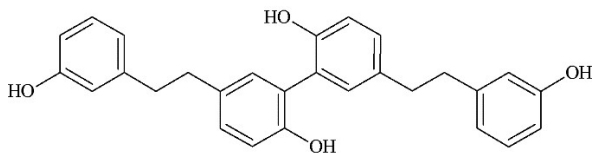
²Farmaceutická fakulta UK v Bratislave. Centrálné laboratórium NMR, Odbojárov 10, 83232 Bratislava

Bis(bibenzylové) zlúčeniny vykazujú antioxidačnú, antimikróbnu, antimykotickú a cytotoxickú aktivitu [1].

Izoperotetín A (obr. 1) je acyklický polyfenolový bis(bibenzylový) spojený bifenylovou väzbou. Bol izolovaný z pečeňovky *Radula perrottetii* pochádzajúcej z Japonska [2, 3].

V rámci projektu sa totálnou syntézou získala zlúčenina izoperotetínu A vo väčšom množstve, vhodnom na testovania a ďalšie chemické modifikácie s cieľom zvýšenia biologickej aktivity.

Východiskovou zlúčeninou pre syntézu bol 4-metoxybenzaldehyd, ktorý sa po jodácii na 3-jód-4-metoxybenzaldehyd využil pri Ullmannovej kondenzácii za vzniku 6,6'-dimetoxybifenylového 3,3'-dikarbaldehydu. Paralelne sa z 3-metoxybenzylchloridu pripravila trifenylofosfániová soľ. Dvojitou Wittigovou reakciou fosfániovej soli a bifenylového aldehydu v pomere 2:1 vznikli tri druhy izomérov, ktoré boli odseparované v pomere 1 (Z/Z) : 2,14 (E/Z) : 1,25 (E/E). Redukciou vodíkom za použitia katalyzátora Pd/C s následnou demetyláciou s využitím BBr₃ vznikol izoperotetín A s celkovým výťažkom 7,1%. Štruktúry a čistota produktu a medziproduktov boli potvrdené spektrálnymi metódami.



Obr. 1 Štruktúra izoperotetínu A.

Práca vznikla za podpory grantov VEGA 1/0054/19, APVV-17-0373 a FaF UK/9/2021

- [1] Asakava, Y.: *Curr Pharm Des.* 14, 3067-3088 (2008).
- [2] Asakawa, Y.: *Phytochemistry.* 65, 623-669 (2004).
- [3] Toyota, M a kol.: *Phytochemistry.* 37, 859-862 (1994).

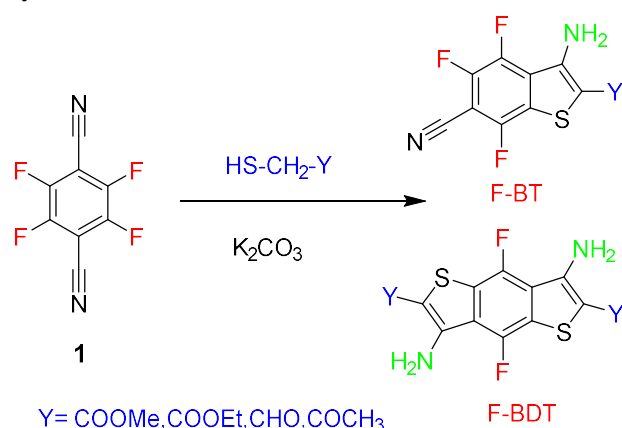
4Po26

SYNTHESIS OF NEW TETRAFLUOROTEREPHTALONITRILE DERIVATIVES AS POTENTIAL BIOLOGICALLY ACTIVE COMPOUNDS AND NOVEL OPTO-ELECTRONIC MATERIALS

Daniel Végh, Branislav Pavílek, Dušan Bortňák and Viktor Milata

Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry, Slovak University of Technology, Radlinského street 9, SK-812 37 Bratislava, Slovakia
email: daniel.vegh@stuba.sk, viktor.milata@stuba.sk

Synthesis of new fluorine containing biologically active molecules and utilization of perfluoroaromatics for molecular recognition has in recent years been an intensely studied topic [1-3]. Tetrafluorophthalonitrile (**1**) and its functional derivatives are attractive building blocks for the synthesis of biologically relevant fluorinated heterocyclic compounds and some its new synthetic utilisation studied in our laboratories. Recently, the convenient and new synthesis of highly fluorinated 3,4-substituted-1-benzo[b]thiophene (**F-BT**) and benzo[1,2-*b*;4,5-*b'*]dithiophene (**F-BDT**) derivatives is described too from tetrafluorophthalonitrile (**1**) and tetrafluoroterephthalaldehydes. The first stage of the procedure is the nucleophilic aromatic substitution of the fluorine atom, promoted by an electron-withdrawing substituent in the *ortho*-position, next an aldol type cyclisation is followed by dehydration and aromatization of the system.



The target compounds **F-BT** and **F-BDT** can be used as building blocks for novel materials with optoelectronic properties, OLED materials, fotolabeling reagents or as photosensitizers and excellent antibacterials. Structures of target compounds were proved by IR, UV, ¹H NMR, ¹³C NMR and ¹⁹F NMR spectral methods, and by X-ray analysis.

This work was financially supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-17-0513.

- [1] Soloshonok, V.: Fluorine-Containing Synthons, ACS Symposium Series : Washington DC (2005).
 [2] Liang, Y. Y., Feng, D. Q., Wu, Y., Tsai, S. T., Li, G., Ray, C., Yu, L. P.: *J. Am. Chem. Soc.*, 131, 7792 (2009).
 [3] Hagfeldt A., Grätzel M.: *Acc. Chem. Res.*, 33, 269 (2000).

4Po27

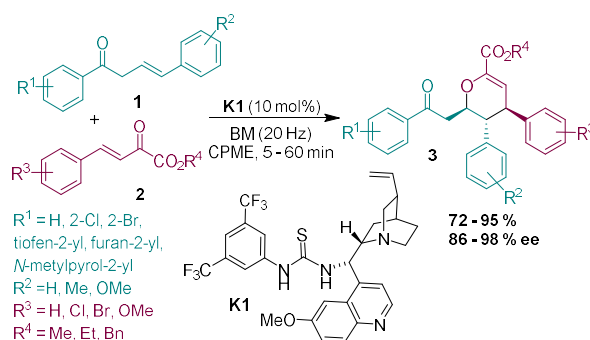
ENANTIOSELEKTÍVNA SYNTÉZA 3,4-DIHYDROPYRÁNOV CYKLOADIČNOU REAKCIOU

Viktória Modrocká¹, Mária Mečiarová¹, Radovan Šebesta¹

¹Katedra organickej chémie, Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského, Mlynská dolina CH-2, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, modrockal@uniba.sk

Dihydropyránové štruktúry sa nachádzajú v molekulách mnohých prírodných látok, syntetických liečiv (zanamivir, swertiamarin), ako aj zlúčenín s biologickou aktivitou (ligstrosid, oleuropein) [1,2]. Dihydropyrány je možné pripraviť asymetrickou Dielsovou-Alderovou reakciou diénov s akceptornými skupinami a dienofilov s donornými skupinami. Tento typ reakcie sa nazýva Dielsova-Alderova reakcia s obrátenými elektrónovými požiadavkami. V literatúre sú ako substráty Dielsovej-Alderovej reakcie opísané najčastejšie rôzne β,γ -nenасыtené ketóny, amidy, β,γ -nenасыtené diketóny alebo ketoestery, vhodné pre tento typ anulačnej reakcie.

V našej práci sme na prípravu 3,4-dihydropyránov zvolili kombináciu β,γ -nenасыtených ketónov **1** s β,γ -nenасыtenými ketoesterami **2**, ktorá nebola v literatúre doposiaľ opísaná. Na zabezpečenie enantioselektívneho priebehu reakcie sa použil tiomočovínový katalyzátor **K1** na báze chinínu. Priebeh cykloadičnej reakcie prípravy 3,4-dihydropyránov **3** sme študovali v rôznych rozpúšťadlách preferovaných z hľadiska udržateľného rozvoja, ako aj v podmienkach mechanickej aktívácie v guľovom mlyne. V podmienkach mechanickeho mletia s CPME ako kvapalinou podporujúcej mletie (LAG) vznikali 3,4-dihydropyrány **3** vo výťažkoch 72–95 % a optických čistotách 86–98 % ee. Pripravili sme 12 nových, doposiaľ neopísaných dihydropyránov **3** a relatívnu konfiguráciu ich stereogénnych centier sme stanovili pomocou 2D NMR spektroskopie.



Ob r. 1 Enantioselektívna organokatalytická syntéza 3,4-dihydropyránov

Táto práca vznikla vďaka finančnej podpore Slovenskej agentúry pre výskum a vývoj, projekt APVV-17-0239 a UK grantu UK/60/2021.

- [1] Xu, Z.; Li, Y.; Xiang, Q.; Pei, Z.; Liu, X.; Lu, B.; Chen, L.; Wang, G.; Pang, J.; Lin, Y. *J. Med. Chem.* 53, 4642 (2010).
 [2] Mosey, R. A.; Floreancig, P. E. *Nat. Prod. Rep.* 29, 980 (2012)

4Po28

PHOTOCHEMISTRY OF PYRIDINE/QUINOLINE HYDRAZONE PHOTOSWITCHES

Bernard Mravec¹, Juraj Filo¹, Marek Cigáň¹

¹Katedra organickej chémie, Prírodovedecká fakulta UK, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, mravec7@uniba.sk

Hydrazones as a relatively new group of photoswitches are in the center of interest due to their high thermal stability. Simple structural modifications and tunability of photochromic properties allow to use them as powerful light driven molecular tools in many applications [1].

Herein, we presented group of 2-(*p*-nitrobenzoyl)pyridine hydrazone photoswitches [2] with a good photoconversion and decent photoisomerization quantum yields (Figure 1). Quantum-chemical calculations in conjunction with experimental data provide fully understanding of photoinduced isomerization mechanism. In the effort to increase a biological application potential, 2-naphthoylquinoline derivatives were investigated [3].

Acknowledgement:

We would like to thank to Šimon Budzák, Medved Miroslav, Lukáš F. Pašteka, Chavdar Slavov, Torben Saßmannshausen, Josef Wachtveitl for co-operation on this work.

We would like to thank to the Slovak Research and Development Agency (APVV-20-0098) for financial support.

- [1] Shao B., Qian H.; Li, Q., Arahamian, I.: *J. Am.*

Chem. Soc. 141, 8364 (2019).

- [2] Mravec, B., Filo, J., Csicsai, K., Garaj, V., Kemka, M., Marini, A., Mantero, M., Bianco, A., Cigán, M.: *Phys. Chem. Chem. Phys.* 21, 24749 (2019).
- [3] Mravec, B., Budzák, Š., Medved, M., Pašteka, L.F., Slavov, Ch., Saßmannshausen, T., Wachtveil, J., Kožíšek J., Hegedúšová L., Filo J., Cigán, M. *J. Org. Chem.*, submitted manuscript.

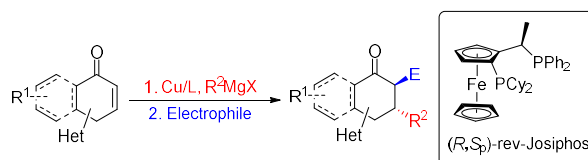
4Po29

ASYMETRICKÁ TANDEMOVÁ KONJUGOVANÁ ADÍCIA GRIGNADOVÝCH ČINIDIEL NA HETEROCYKlickÉ MICHAELOVE AKCEPTORY A REAKCIA S ELEKTROFILMI

Brigita Mudráková¹, Radovan Šebesta¹

¹Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra organickej chémie, Ilkovičova 6, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava 4; brigitta.mudrak@gmail.com

Chirálné heterocyklické zlúčeniny sú dôležitými stavebnými blokmi prírodných zlúčenín ako aj liečiv. Metóda stereoselektívnej tandemovej reakcie, založená na Cu-katalyzovaných konjugovaných adíciách organokovových zlúčenín na Michaelove akceptory umožňuje efektívne získavať dôležité zlúčeniny z jednoduchých východiskových materiálov [1]. Zároveň sa tým šetrí čas a znižuje prácnosť keďže medzi produkty netreba izolovať a čistiť. Takéto reakcie vyžadujú okrem kontroly chemickej reaktivity aj kontrolu stereochemického priebehu. V našich predchádzajúcich štúdiách sme skúmali enantio- a diastereoselektívnu Cu-katalyzovanú konjugovanú adíciu Grignardových činidiel na nereaktívne Michaelove akceptory (ako sú α,β -nenasýtené karbonylové zlúčeniny a amidy) a následnú reakciu *in situ* vzniknutého enolátu s rôznymi stabilizovanými karbéniovými kationmi [2, 3]. Na základe predošlých štúdií sme sa zamerali na domino reakcie heterocyklických zlúčenín, a to na kumarínové a chromónové deriváty. Najlepšie výsledky enantioselektívnej Cu-katalyzovanej konjugovanej adície Grignardových zlúčenín na tieto heterocyklické zlúčeniny boli dosiahnuté pomocou chirálneho ferocénového ligandu (R,S_p -rev-Josiphos). *In situ* vznikajúce enoláty boli zachytávané reakciou so stabilizovanými kationmi ako sú tropýliový alebo benzoditioliový. Výsledné produkty domino reakcie boli izolované v dobrých až vysokých výťažkoch (25-86%) s vysokými enantiomérnymi nadbytkami (84-92% ee).



Obr. 1 Asymetrická konjugovaná adícia heterocyklov a reakcia s elektrofilmi.

Túto prácu podporila Slovenská agentúra pre výskum a vývoj na základe zmluvy č. APVV-18-0242.

- [1] Vargová D., Némethová I., Plevová K., Šebesta R.: *ACS Catal.* 9, 3104 (2019).
- [2] Drusan M., Rakovský E., Marek J., Šebesta R.: *Adv. Synth. Catal.* 357, 1493 (2015).
- [3] Vargová D., Pérez J. M., Harutyunyan S. R., Šebesta R.: *Chem. Commun.* 55, 11766 (2019).

4Po30

SYNTHESIS OF 5-PHENYLAZOPYRIMIDINES AND THEIR PHOTOCHEMICAL PROPERTIES

Lucie Mužíková Čechová^{1,2}, Juraj Filo³, Martin Dračinský¹, Zlatko Janeba¹, Marek Cigán³, Eliška Procházková¹

¹Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, the Czech Academy of Sciences, Flemingovo nám. 2, 166 10 Prague, Czech Republic

²University of Chemistry and Technology Prague, Technická 5, 166 28 Prague, Czech Republic

³Comenius University, Faculty of Natural Sciences, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovakia

5-Phenylazopyrimidines are structurally similar to azobenzenes, where one phenyl ring is replaced by pyrimidine. Their photoswitching is based on a reversible *trans-cis* isomerization. Such molecules may obtain new prominent properties, such as keto/enol tautomerism, presence of protonation sites or higher biocompatibility.

In this work, we prepared new series of photosensitive 5-phenylazopyrimidines and we studied their photochemical properties by NMR spectroscopy with *in situ* irradiation, optical spectroscopy and DFT calculations. Synthesis was based on an azo coupling of diazonium salts from substituted anilines with the corresponding pyrimidines. Reactivity of diazonium salts is highly substituent-dependent, e.g. *para* electron-withdrawing substituents raise their reactivity. Consequent modifications at positions 4 and 6 of pyrimidine gave desired products, which can be divide into three classes based on a number of hydrogen bond donors: a) without, b) with one, and c) with two intramolecular hydrogen bonds (IMHBs). The IMHBs as well as push-pull

character destabilize the *cis* isomer significantly^{1,2}. These results led us to design of new ultrafast non-ionic photochromic oscillators (Fig. 1)³.

This detailed mechanistic study leads to a better understanding of the photochemical behaviour of 5-phenylazopyrimidines and gives an opportunity to design novel photoswitches, which could find a wide range of applications in optoelectronics, photopharmacology or material science.

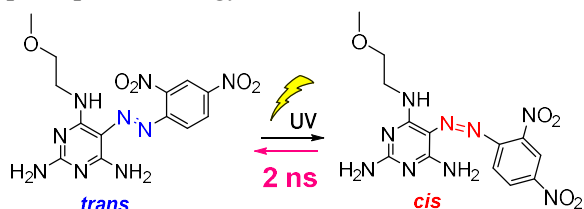


Fig. 1 Ultrafast non-ionic photoswitch with the fastest relaxation back to the initial *trans* isomer.

This work was supported by the Institute of Organic Chemistry and Biochemistry (RVO 61388963).

- [1] Procházková E., Čechová L., Kind J., Janeba Z., Thiele C., Dračínský M.: *Chem. Eur. J.* 24, 492 (2018).
- [2] Čechová L., Kind J., Dračínský M., Filo J., Janeba Z., Thiele C., Cigáň M., Procházková E.: *J. Org. Chem.* 83, 5986 (2018).
- [3] Čechová L., Filo J., Dračínský M., Slavov C., Sun D., Janeba Z., Slanina T., Wachtveitl J., Procházková E., Cigáň M.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 59, 15590 (2020).

4Po31

PRIAMA JODÁCIA BENZOTIAZOLOV – RÝCHLY PRÍSTUP KU KVADRUPOLÁRNYM FLUOROFORM S VYSOKOU DVOJFOTÓNOVOU ABSORPCIOU

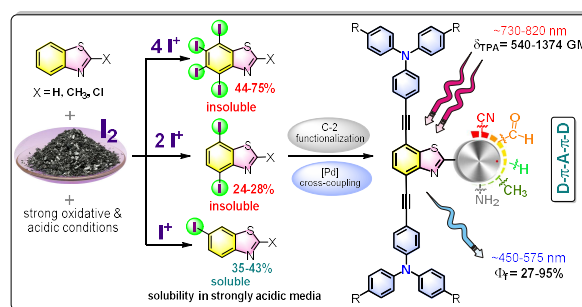
Jela Nociarová¹, Patrik Osuský¹, Erik Rakovský¹, Dimitris Georgiou,² Ioannis Polyzos,² Mihalis Fakis,² Peter Hrobárik¹

¹Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, 842 15 Bratislava, Slovensko

²Department of Physics, University of Patras, GR-26504 Patras, Greece

Priama jodácia 2-R-benzotiazolov (R = H, CH₃ alebo Cl) v silne kyslých a oxidačných podmienkach (I₂/KMnO₄/H₂SO₄) vedie k izolácii zmesi jodovaných heteroarénov, ktorej zloženie je možné ovplyvniť množstvom použitého jódu. Pri použití 0,65 ekvivalentov I₂ vznikajú hlavne mono- a dijódované produkty, ktoré je možné ľahko oddeliť na základe ich rozdielnej rozpustnosti v silne kyslých vodných roztokoch.

Medzi produktami izolovanými v dobrých výťažkoch (24-28 %) sú 4,7-dijódbenzotiazoly. Zaujímavá kvázisymetrická 4,7-substitúcia na benzotiazolovom jadre, ktorá je pre takéto systémy relatívne vzácna a len ťažko synteticky dostupná iným spôsobom, ich predurčuje na využitie pri konštrukcii kvázikvadrupolárnych systémov s D- π -A- π -D architektúrou. Pripravené dijódderiváty boli ďalej modifikované v reaktívnej polohe 2 na benzotiazolovom jadre s cieľom laďiť elektrónové vlastnosti centrálného jadra: 2-chlór-4,7-dijódbenzotiazol bol pomocou nukleofilných substitúcií prevedený na nitril a amín a zo 4,7-dijódbenzotiazolu bol formyláciou príslušnej aryllítnej soli pripravený 4,7-dijódbenzotiazol-2-karbaldehyd. Následne boli zo spomínaných dijódderivátov Sonogashirovým cross-couplingom pripravené 4,7-bis(triarylamín-etinyl)benzotiazoly – nové vysokoúčinné fluorofory s vysokou dvojfotónovou absorpciou (540–1374 GM) v blízkej IČ oblasti.



Tento výskum bol podporený Ministerstvom školstva, vedy, výskumu a športu (VEGA, grant 1/0712/18), Agentúrou na podporu výskumu a vývoja (Grant APVV-17-0324), Európskou komisiou v rámci programu Marie Skłodowska-Curie (TWOSENS, grant č. 752285) a Univerzitou Komenského (UK/366/2021).

- [1] Nociarová, J., Osuský, P., Rakovský, E., Georgiou, D., Polyzos, I., Fakis, M., Hrobárik, P.: *Org. Lett.* 23, 3460 (2021).

4Po32

STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA NOVÝCH IZOMÉRNÝCH AZA-ANALÓGOV PRÍRODNÉHO JASPÍNU B

Michaela Novotná¹, Miroslava Martinková¹, Jana Špaková Raschmanová¹

¹Katedra organickej chémie, Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P.J. Šafárika, Moyzesova 11, 040 01, Košice, michaela.novotna@student.upjs.sk

Viacere prírodné látky disponujúce sfingolipidovou štruktúrou predstavujú vhodných kandidá-

to pre výskum a vývoj nových protirakovinových látok. Jaspín B patriaci do rodiny cyklických sfingolipidov disponuje pozoruhodnou cytotoxicitou deklarovanou na širokom spektre rakovinových bunkových línií. [1] Spomínaný anhydrofytosfingozín a rovnako tak aj jeho stereooizoméry inhibujú obe formy enzýmu sfingozinkináza (SphK1 a SphK2). [2] Vyššie zmienené skutočnosti stimulovali mnohé výskumné skupiny, ktoré za obdobie ostatných 17 rokov vypracovali enormný počet syntetických prístupov vedúcich nielen k samotnému jaspínu B a jeho stereochemickým partnerom, ale aj rôzne modifikovaným derivátom. [1,3]

Ako je znázornené v Schéme 1, predkladaná práca prezentuje stratégiu prípravy nových regioizomérnych aza-analógov jaspínu B (látky **1** a **2**), založenú na osvedčenej metóde *the Chiron approach* využívajúcej chránený d-manitol ako východiskový chirón **12**. Vypracovaný zámer aplikuje postupne sekvenčný [3,3]-sigmatropný prešmyk bisimidátu **11** inkorporujúci požadované stereocentrá s maskovanou aminoskupinou, dve bázičky sprostredkované cyklizácie zabezpečujúce najprv tvorbu príslušných oxazolidinónov **7** a **8** a neskôr kreovanie pyrolidínových templátov **3** a **4**, a napokon OCM reakciu pre implementovanie hydrofóbného reťazca.

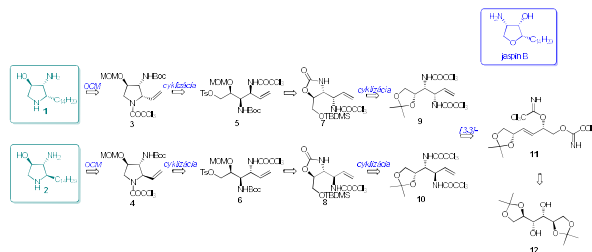


Schéma 1: Retrosyntéza prípravy cieľových štruktúr

Práca vznikla vďaka podpore projektov Vedeckej grantovej agentúry MŠVVaŠ SR (VEGA 1/0375/19 a VEGA 01/0047/18), Slovenskej agentúry pre podporu výskumu a vývoja (APVV-14-0883) a v rámci operačného programu Integrovaná infraštruktúra pre projekt Otvorená vedecká komunita pre moderný interdisciplinárny výskum v medicíne (OPENMED), kód ITMS2014+: 313011V455, spolufinancovaný zo zdrojov Európskeho fondu regionálneho rozvoja.

- [1] Martinková, M., Gonda, J.: *Carbohydr. Res.* 423, 1–42 a práce tam citované (2016).
- [2] Yoshimitsu, Y., Oishi, S., Miyagaki, J., Inuki, S., Ohno, H., Fujii, N.: *Bioorg. Med. Chem.* 19, 5402–5408 (2011).
- [3] Martinková, M., Gonda, J.: *Carbohydr. Res.* 482, 107737 a práce tam citované (2019).

4Po33

OXIDATIVE C-H HOMOCOUPLING OF PUSH-PULL BENZOTHAZOLES: AN ATOM-ECONOMICAL ROUTE TO HIGHLY EMISSIVE QUADRUPOLEAR ARYLAMINE-FUNCTIONALIZED 2,2'-BIBENZOTHAZOLES WITH ENHANCED TWO-PHOTON ABSORPTION

Patrik Osuský,¹ Jela Nociarová,¹ Maroš Smolíček,¹ Róbert Gyepes,² Dimitris Georgiou,³ Ioannis Polyzos,³ Mihalis Fakis,³ and Peter Hrobárik^{1,4}

¹ Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, SK-84215 Bratislava, Slovakia

² Faculty of Science, Charles University in Prague, Hlavova 2038/8, CZ-12843 Prague, Czech Republic

³ Department of Physics, University of Patras, GR-26504 Patras, Greece

⁴ Laboratory for Advanced Materials, Comenius University Science Park, Ilkovičova 8, SK-84215 Bratislava, Slovakia

Copper-catalysed C-H/C-H coupling of dipolar 2-H-benzothiazoles end-capped with triphenylamine moieties affords highly fluorescent 2,2'-bibenzothiazoles with D- π -A- π -D architecture displaying large two-photon absorption (TPA) cross-sections (543-1252 GM) in the near-infrared region. The notably higher TPA performance as compared to quadrupolar π -systems with a widely-used 2,2'-bipyridine cores, along with the ease of the synthesis and chelating N^N ability makes the title biheteroaryl platform an attractive building block for a large scope of functional dyes exploiting nonlinear optical phenomena [1, 2, 3]

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency (Grant No. APVV-17-0324), the Grant Agency of the Ministry of Education of the Slovak Republic (VEGA Project No. 1/0712/18) as well as by the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under Grant No. 810701 (LAMatCU) and the Marie Skłodowska-Curie Grant No. 752285.

- [1] Xu, L.; Lin, W.; Huang, B.; Zhang, J.; Long, X.; Zhang, W.; Zhang, Q. *J. Mater. Chem. C*, 9, 1520-1536 (2021).
- [2] Xu, L.; Zhang, J.; Yin, L.; Long, X.; Zhang, W.; Zhang, Q. *J. Mater. Chem. C*, 8, 6342-6349 (2020).
- [3] Karges, J.; Kuang, S.; Maschietto, F.; Blacque, O.; Ciofini, I.; Chao, H.; Gasser, G. *Nat. Commun.*, 11, 3262 (2020).

4Po34**SURFACE MODIFICATION VIA SURFACE INITIATED PHOTO ATRP.**Darshak Pathiwada¹, Jaroslav Mosnáček^{1,2}¹*Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dubravská cesta 9, 845 41 Bratislava, darshak.pathiwada@savba.sk*²*Centre for Advanced Materials Application, Slovak Academy of Sciences, Dubravská cesta 9, 845 11 Bratislava*

PhotoATRP is receiving significant notice due to its low cost of operation, using ppm level of catalyst, tolerance towards oxygen, the accurate control of reaction time, mild reaction conditions, and eliminate the use of additional chemicals [1-3]. Polymer surfaces synthesized via surface-initiated atom transfer radical polymerization (SI-ATRP) can impart desired properties such as solubility in multiphase media, functionality, antifouling etc. SI-PhotoATRP helps in the synthesis of well-controlled polymer brushes over large areas by using minimal reaction volumes [4].

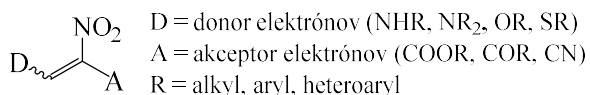
In present work, polymer brushes are grown on various inorganic substrates, such as silica wafer, Al₂O₃, TiO₂ and ITO. Initially, ATRP initiator motifs are attached to the silica substrate by using vapour deposition, these act as initiator sites for the development of polymer brushes. Various studies are needed to understand the effects of catalyst concentration, the intensity of light, oxygen concentration on the growth of polymer brushes. The surfaces will be modified by various functional polymers including polymers from renewable monomers such as α -methylene- γ -butyrolactone or vinyl derivatives of furan bearing functional groups. The functional polymers can be used for subsequent postfunctionalization of the surfaces.

The authors thank the grant Agency VEGA for financial support through Grant VEGA 2/0168/21 and project APVV-19-0338. This work was also performed during the implementation of the project Building-up Centre for advanced materials application of the Slovak Academy of Sciences, ITMS project code 313021T081 supported by the Integrated Infrastructure Operational Programme funded by the ERDF.

- [1] Mosnáček J., Eckstein-Andicsová A., Borská K.: *Polym. Chem.* 6, 2523 (2015).
- [2] Pan X., Tasdelen M. A., Laun J., Junkers T., Yagci Y., Matyjaszewski K.: *Prog. Polym. Sci.* 62, 73 (2016).
- [3] Borská K., Moravčíková D., Mosnáček J.: *Macromol. Rapid Commun.* 38, 1 (2017).
- [4] Yan W., Dadashi-Silab S., Matyjaszewski K.,

Spencer N. D., Benetti, E. M.: *Macromolecules.* 53, 2801 (2020).**4Po35****TRI-SUBSTITUOVANÉ PUSH-PULL NITROALKÉNY V SYNTÉZE HETEROCYKLOV**Branislav Pavilek¹, Dušan Bortňák¹, Daniel Végh¹, Viktor Milata¹¹*Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Brano.Pavilek@gmail.com*

Titulné zlúčeniny (Obr. 1) sú všestranné a často využívané stavebné bloky v syntéze heterocyklických derivátov [1], z ktorých mnohé vykazujú biologickú aktivitu (inhibitory kaspázy 1 pri liečbe zápalového akné, inhibitory PIN1 pri liečbe rakoviny, syntéza alkaloidu meridianínu G, syntéza peramínu s repelentným účinkom, JAK inhibitory pri liečbe ochorenia dýchacích ciest). Prezentovaná skupina nitroalkénov ochotne reaguje s mono- a binukleofilmi S_NV mechanizmom. V prípade reakcie s 1,2- a 1,3-binukleofilmi môže nasledovať druhý adično-eliminácia krok, v ktorom vzniknú príslušné 5- a 6-článkové heterocykly [2]. Push-pull nitroalkény môžu byť využité v Dielsových-Alderových cykloadičných reakciách ako heterodiény alebo dienofily v závislosti od reakčných podmienok [3]. V minulosti boli publikované aj atypické reakcie titulných nitroalkénov vo fragmentačných a dimerizačných reakciách. Detailné štúdium literatúry odhalilo viaceré málo preskúmané oblasti týchto nitroalkénov z hľadiska ich reaktivity s 1,2- a 1,4-binukleofilmi a to hlavne s O- a S-nukleofilmi. Na základe tohto zistenia bola navrhnutá a uskutočnená syntéza nitroalkénov (D = OEt, OMe / A = COOEt, COOMe, COMe, CN) so sériou 1,2-binukleofilov (deriváty hydrazínov a estery kyseliny tioglykolovej) za účelom prípravy širokej škály pyrazolových a tiofénových derivátov s potenciálnou biologickou aktivitou. Mnohé východiskové zlúčeniny (A = COMe, CN) nie sú komerčne dostupné a preto museli byť pripravené modifikovaním postupov známych pre prípravu zlúčenín s A = COOR.



Obr. 1 Všeobecná štruktúra titulných nitroalkénov.

Práca bola uskutočnená s finančnou podporou projektu APVV-17-0513.

- [1] Molander G. A., Trost B. M., Abramite J. A., Arrayás R. G., Avilov D., Block E., Carretero J. C., Collier S. J., Dittmer D., Drabowicz J., Gaumont A.-C., Gulea M., Jubault P., Keglevich G., Kiełbasiński P., Leclerc E., McLaws M. D., Mikołajczyk M., Ono N., Quirion J.-C., Reissig H.-U., Sammakia T., Sammons M. F., Szelke H., Zimmer R.: *Houben–Weyl Methods of Molecular Transformations*, 337 (2013).
- [2] a) Nishiwaki N., Takada Y., Inoue Y., Tohda Y., Ariga M.: *J. Heterocycl. Chem.* 473 (1995).
 b) Fournier J. F., Clary L., Chambon S., Dumais L., Harris C. S., Millois C., Pierre R., Talano, S., Thoreau É., Aubert J., Aurelly M., Bouix-Peter C., Brethon A., Chantalat L., Christin O., Comino C., El-Bazbouz G., Ghilini A. L., Isabet T., Lardy C., Luzy A. P., Mathieu C., Mebrouk K., Orfila D., Pascau J., Reverse K., Roche D., Rodeschini V., Hennequin L. F.: *J. Med. Chem.* 4030 (2018).
- [3] a) Ruffoni A., Casoni A., Pellegrino S., Gelmi M. L., Soave R., Clerici, F.: *Tetrahedron* 1951 (2012)
 b) Wada E., Yoshinaga M.: *Tetrahedron Lett.* 2197 (2004).

4Po36

STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA SPIROCYKlickÝCH OXINDOLOV KATALYZOVANÁ CHIRÁLNymi BIFUNKČNymi SKVARAMIDMI

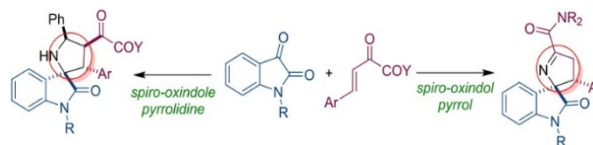
Tibor Peňaška¹, Vitalii Palchykov², Radovan Šebesta¹

¹Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského v Bratislave, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovenská republika (tibor.penaska@uniba.sk)

²Výskumný inštitút chémie a geológie, Dnepropetrovská národná univerzita Olesa Gončara, Gagarina Av. 72, Dnipro, Ukrajina

Mnohé chirálne spirocyklické oxindoly (pyrolidíny) tvoria významnú skupinu zlúčenín vykazujúcich zaujímavé biologické vlastnosti a práve preto je štúdiu ich prípravy neustále venovaná vysoká pozornosť.[1] Jedným zo syntetických spôsobov prípravy takýchto molekúl je využitie stereoselektívnej (3+2)-cykloadície *in situ* generovaných azometínových ylidov s nenasýtenými α -ketoestermi a α -ketoamidmi.[2] Reakcia je katalyzovaná prostredníctvom bifunkčného skvaramidového katalyzátora s chinínovom jednotkou a produkty sú izolované vo výťažku až 87% s enantiomérnym nadbytkom (po rekryštalizácii produktu) až 72% *ee*. V práci

je testovaná a porovnávaná séria rôznych bifunkčných katalyzátorov (skvaramidy a tiomočoviny), konfigurácia produktov bola stanovená pomocou kryštalografickej analýzy. Pri použití α -ketoamidov ako východiskového materiálu boli izolované okrem spirocyklických pyrolidínov aj spirocyklické pyroly ako produkty konkurenčnej reakcie, naopak α -ketoestery poskytovali diastereoselektívny priebeh a produktami boli výlučne spirocyklické pyrolidíny. Pomocou ¹H NMR, GC-MS a DFT výpočtov sme sa pokúsili navrhnúť predpokladaný mechanizmus pre obe reakčné cesty.



Táto práca vznikla vďaka finančnej podpore Agentúry na podporu výskumu a vývoja (grant číslo APVV-18-0242).

- [1] Tian L., Hu X.-Q., Li Y.-H., Xu P.-F. *Chem. Commun.* 49, 7213 (2013).
 [2] Peňaška T., Palchykov V., Rakovský E., Addová G., Šebesta R.: *Eur. J. Org. Chem.* 1693 (2021).

4Po37

2,5-DISUBSTITUOVANÉ 1,3,4-OXADIAZOLY JAKO VYSOCE ÚČINNÁ POTENCIÁLNÍ ANTITUBERKULOTIKA

Václav Pflégr¹, Martin Krátký¹, Jarmila Vinšová¹

¹Univerzita Karlova, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Akademika Heyrovského 1203/8, 500 05 Hradec Králové, PflégrV@faf.cuni.cz

Tuberkulóza (TBC) je závažné infekčné onemocnění vyvolané komplexem *Mycobacterium tuberculosis* (*Mtb.*). Jednou z hlavních komplikácií terapie TBC je zvyšujúci sa rezistencia mykobakteriálnych kmenů vůči konvenčně užívaným léčivům. Tento fakt představuje závažný problém zejména pro imuno-kompromitované pacienty (pacienti s AIDS, po transplantacích, onkologičtí pacienti apod.) [1]. Klesající účinnost běžných léčiv stále zvyšuje poptávku po nových antimykobakteriálně účinných molekulách.

Již dříve bylo prokázáno, že vhodně substituované malé heterocyklické molekuly (např. oxadiazoly, tetrazoly a triazoly) mohou být nositeli významné antimykobakteriální aktivity [2]. Připravili jsme unikátní sérii 2,5-disubstituovaných 1,3,4-oxadiazolů s velmi slibnou aktivitou proti několika mykobakteriálním kmenům. Deriváty jsou dostupné např. dehydrativní cyklizací asymetrických 1,2-

diacylhydrazinů pomocí tosylchloridu v přítomnosti triethylaminu jako báze [3]. Samotné 1,2-diacylhydraziny se snadno připraví reakcí acylchloridu (komerčně dostupného, nebo připraveného reakcí karboxylové kyseliny s chloridem thionylu) s příslušným hydrazidem. Reakce jsou snadno proveditelné a obyčejně probíhají ve vysokém výtěžku.

U získaných sloučenin byla stanovena jejich *in vitro* antimykobakteriální aktivita vůči citlivému kmenu *Mtb.* H₃₇Rv, dvěma netuberkulózním mykobakteriálními kmenům (*M. avium*, *M. kansasii*) a také vůči sedmi multirezistentním kmenům *Mtb.* Stanovení mechanismu účinku, indexu selektivity a aktivity proti grampozitivním a gramnegativním bakteriím a houbovým patogenům je nyní předmětem zkoumání.

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR (reg. č. 20-19638Y) a Univerzity Karlovy (SVV 260 547).

- [1] WORLD HEALTH ORGANIZATION, *Global Tuberculosis Report 2020* (2021).
 [2] Vosátka R., Krátký M., Švarcová M., Janoušek J., Stolaříková J., Madacki J., Huszár S., Mikušová K., Korduláková J., Trejtnar F., Vinšová J.: *Eur. J. Med. Chem.* 151, 824 (2018).
 [3] Dolman S. J., Gosselin F., O'Shea P. D., Davies I. W.: *J. Org. Chem.* 71, 9548 (2006).

4Po38 EFEKTÍVNA PRÍPRAVA (2S,4S)- 4HYDROXYGLUTAMÍNU. FORMÁLNA SYNTÉZA HEMEROCALLISAMÍNU I

Lucia Pinčeková,¹ Eva Jančiová,¹ Dušan Berkeš,¹
Ol'ga Caletková¹

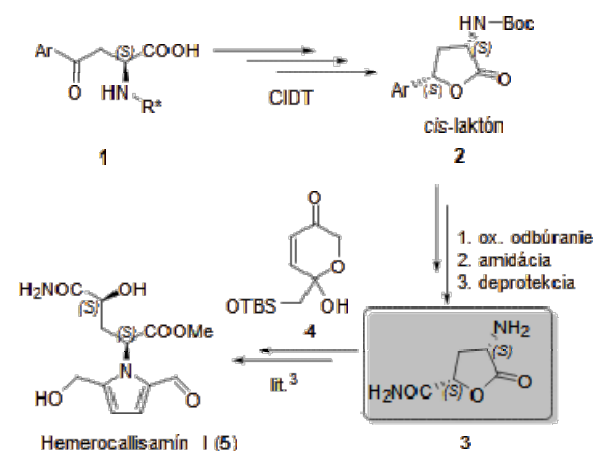
¹Oddelenie organickej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, lucia.pincekova@stuba.sk

Glutamín je najrozšírenejšia voľná aminokyselina nevyhnutná pre rast normálnych a neoplastických buniek. Spolu s jeho hydroxy substituovanými derivátmi zohráva dôležitú úlohu pri liečbe porúch spánku a iných neurologických ťažkostí. Najmä 4-hydroxyglutamín je súčasťou viacerých prírodných látok ako hemerocallisamín I, longitubanín A, pinnatanín, oxypinnatanín. Vo viacerých prípadoch nie je známa absolútna konfigurácia molekuly. Existuje len niekoľko prác venovaných príprave stereoizomérov 4-hydroxyglutamínu [1]. Ich efektívna syntéza v enantiomére čistej forme je preto stálou výzvou.

V príspevku popisujeme jednoduchú prípravu amidu kyseliny *cis*-4-amino-5-

oxotetrahydrofuránkarboxylovej (3) ako kľúčového intermediátu pre syntézu hemerocallisamínu I s využitím nami rozvíjanej metodiky kryštalizáciou indukovanej diastereomérskej transformácie (CIDT) [2].

Navrhnutá syntéza glutamínového derivátu vychádza z opticky čistého *cis*-2-aminobutyrolaktónu 2 ako kľúčového intermediátu pripraveného aplikáciou CIDT. Úspešné prepojenie metódy CIDT s následnou oxidáciou aromatického jadra otvára možnosti pre syntézu derivátov kyseliny 4-hydroxyglutamovej - štruktúrneho fragmentu hemerocallisamínu I (5) - pyrolového derivátu glutamínu, izolovaného z lupeňov kvetov ľaliovky - *Hemerocallis fulva* [3]. Maillardovou reakciou s derivátom 4 možno po deprotekcii prítomných ochranných skupín pripraviť hemerocallisamín I (5) s požadovanou optickou čistou. Zmena použitej chirálnej auxiliárie umožňuje prístup k druhému enantioméru. Príprava *syn*-diastereoizoméru sa realizuje z *trans*-laktónu, ktorý možno jednoducho pripraviť stereoselektívnou redukciou aminokyseliny a následnou laktónizáciou v podmienkach Steglichovej esterifikácie [2].



Práca vznikla za podpory grantových agentúr APVV-20-0298 a VEGA 1/0489/19

- [1] Piotrowska, D. G.; Głowacka, I. E.; Wróblewski, A. E.; Lubowiecka, L.: *Beil. J. Org. Chem.* 15, 236 (2019).
 [2] Kolarovič, A. and Jakubec, P.: *Adv. Synth. Catal.* (2021).
 [3] Wood, J. M.; Furkert, D. P.; Brimble, M. A. *J. Nat. Prod.* 80, 1926 (2017).

4Po39**ANTISENESCENT N9-SUBSTITUTED PURINE BASED CYTOKININS AND THEIR APPLICATIONS IN BIOTECHNOLOGIES**Lucie Plíhalová^{1,2}, Karel Doležal^{1,2}, Marek Zatloukal¹¹ Department of Chemical Biology, Faculty of Science, Palacký University, Šlechtitelů 27, CZ-783 71, Olomouc, Czech Republic.² Laboratory of Growth Regulators, Palacký University & Institute of Experimental Botany ASCR, Šlechtitelů 27, CZ-783 71, Olomouc, Czech Republic, lucie.plihalova@upol.cz

Cytokinins are plant growth regulators that have a number of regulatory effects on plant growth and development, such as leaf senescence delay, plant protection mechanisms and plant response to abiotic stress [1]. Number of these second generation N9-substituted cytokinin derivatives, especially N9-(tetrahydropyran-2-yl) and N9-(tetrahydrofuran-2-yl)purine cytokinins have been utilized in plant tissue culture so far.

N9-cytokinin derivatives were examined for their antisenescent and antioxidant properties and recently started to be used in tissue culture [2]. These derivatives were also utilized for protective use in agriculture, therefore their biological properties are studied in greater detail [3]. Especially their regulation of leaf senescence delay seems to be very interesting as well as the influence on the root growth.

Current combinatorial organic chemistry enables us to prepare variants of such molecules of natural origin, and improve their biological properties, such as stronger anti-senescent effect and improve protective effect on plants. We focused on the explanation of their possible action from structural point of view to bring more light into the issue how these amazing molecules might act.

This research was funded by an ERDF project entitled "Development of Pre-Applied Research in Nanotechnology and Biotechnology" (No. CZ.02.1.01/0.0/0.0/17_048/0007323) and IGA_PrF_2020_010.

- [4] Davies PJ. The plant hormones: their nature, occurrence, and functions. In: Davies PJ, editors. Plant hormones, biosynthesis, signal transduction, action! Kluwer Academic Publishers; p 1-8 (2004).
- [1] Aremu AO, Bairu MW, Szűčová L, Doležal K, Finnie JF, Van Staden J: Acta Physiol Plant 34, 2265-2273 (2012)
- [2] Koprna R, Novák O, Mičková Z, Pěňčík A: A mixtur efor the treatment of crops against Plasmodiophora brassicae and a preparation containing this mixture, Palacký University in

Olomouc, UV 30989 (2017).

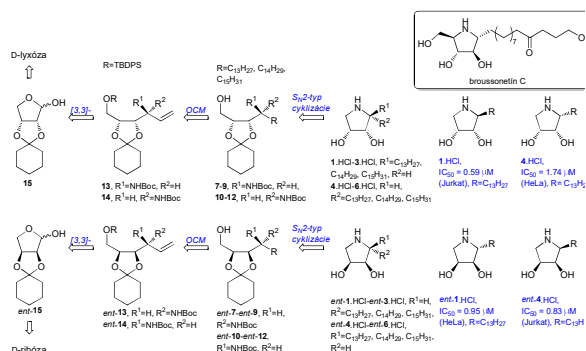
4Po40**STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA CYTOTOXICKÝCH PYROLIDÍNOVÝCH ALKALOIDOV: NOVÉ ANALÓGY PRÍRODNÝCH BROUSSONETÍNŮV**Tatiana Pončáková¹, Dominika Fabiánová¹, Miroslava Martinková¹, Martin Fabián¹, Milica Fabišíková¹, Martina Bago Pilátová², Alexandra Macejová²¹ Ústav chemických vied, Katedra organickej chémie, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika, Moyzesova 11, 040 01 Košice, Slovenská republika,

tatiana.mitrikova@student.upjs.sk

² Ústav farmakológie, Lekárska fakulta, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika, Trieda SNP 1, 040 66, Košice, Slovenská republika

Broussonetíny, základná štruktúra ktorých je na Obrázku 1 ilustrovaná broussonetínom C, boli po prvý krát izolované v roku 1997 Kusanom a kol. z listov stromu *Broussonetia kazinoki* [1]. Ako také, predstavujú rodu viac ako 39 nateraz identifikovaných a popísaných polyhydroxylovaných pyrolidínov s rôzne funkcionalizovanými bočnými reťazcami, pričom viaceré z nich sú účinnými a selektívnymi inhibítormi širokej palety glykozidázových enzýmov s hodnotami IC₅₀ pohybujúcimi sa v nanomolárnych koncentráciách [2,3].

Cieľom prezentovanej stratégie (Obr. 1) je príprava nových typov pyrolidínových alkaloidov **1.HCl-6.HCl** a *ent-1.HCl-ent-6.HCl* (Obr. 1), pričom ako východiskové chiróny boli zvolené templáty **15** a *ent-15* odvodené z d-lyxózy a d-ribózy. Kľúčové kroky nami vypracovaného prístupu zahŕňajú [3,3]-sigmatropné prešmyky pre inkorporovanie stereocentra disponujúceho požadovanou aminoskupinou, skríženú metatézu pre zabudovanie alkylového reťazca a napokon intramolekulovú nukleofilnú substitúciu potrebnú pre kreovanie pyrolidínovej jednotky. Biologický skrining realizovaný na 5 typoch rakovinových bunkových línii odhalil pozoruhodný antiproliferačný/cytotoxický potenciál pripravených broussonetínových analógov **1.HCl-6.HCl** a *ent-1.HCl-ent-6.HCl*.



Obrázok 1: Retrosyntetická cesta prípravy nových typov pyrrolidínov 1.HCl-6.HCl a ent-1.HCl-ent-6.HCl.

Prezentovaná práca vznikla vďaka finančnej podpore grantov VEGA 01/0375/19 a APPVV-14-0883 a v rámci operačného programu Integrovaná infraštruktúra pre projekt Otvorená vedecká komunita pre moderný interdisciplinárny výskum v medicíne (OPENMED), kód ITMS2014+: 313011V455, spolufinancovaný zo zdrojov Európskeho fondu regionálneho rozvoja.

- [1] Shibano, M.; Kitagawa, S.; Kusano, G. *Chem. Pharm. Bull.* 45, 505–508 (1997).
- [2] Zhao, H.; Kato, A.; Sato, K.; Jia, Y.-M.; Yu, C.-Y. *J. Org. Chem.* 78, 7896–7902 (2013).
- [3] Wu, Q.-K.; Kinami, K.; Kato, A.; Li, Y.-X.; Jia, Y.-M.; Fleet, G. W. J.; Yu, C.-Y. *Molecules* 24, 3712, 1–19, (2019).

4Po41

SYNTHESIS OF BODIPY LABELED BISQUATERNARY AMMONIUM SALTS USED AS REACTIVATORS OF INHIBITED ACETYLCHOLINESTERASE

Eliska Prchalova¹, David Malinak^{1,2}, Jana Svobodova¹, Lukas Fresser¹, Rudolf Andrys¹, Zbynek Heger³, Kamil Musilek^{1,2}

¹Faculty of Science, University of Hradec Kralove, Rokitanskeho 62, 500 03 Hradec Kralove, Czech Republic, eliska.prchalova@uhk.cz

²Biomedical Research Centre, University Hospital Hradec Kralove, Sokolska 581, 500 05 Hradec Kralove, Czech Republic

³Department of Chemistry and Biochemistry, Mendel University in Brno, Zemedelska 1, 613 00 Brno, Czech Republic

Oxime reactivators are antidotes used for organophosphate (OP) poisoning. Nowadays are OPs still a threat, not only because of their use as pesticides but also because of a possible misuse by terroristic groups as nerve agents (NA). OPs are fast acting inhibitors of human acetylcholinesterase (AChE) causing cholinergic crisis ultimately leading to death. Treatment of OP intoxication consists of immediate administration of anticholinergics (atropine),

anticonvulsants (diazepam) and oxime reactivators of AChE. Commercially used reactivators are not broad-spectrum reactivators effective against all NAs and moreover they have difficulty to cross the blood-brain-barrier (BBB) due to permanently charged quaternary nitrogen atoms [1]. For example, widely used reactivator 2-PAM crosses the BBB approximately from only 10% [2]. However, most of the techniques used for measuring the concentration of reactivator crossing BBB are *ex vivo* and cannot be observed in real time. BODIPY probe could bring a change as it is a strongly fluorescing probe standardly used for imaging techniques *in vivo* [3]. The aim of this work is to synthesize and purify BODIPY labeled oxime reactivators of AChE and to provide data and compounds for further measurement of the concentration of oximes actively crossing BBB and reactivating brain AChE *in vivo*.

This work was supported by the Czech Science Foundation (No. GA19-13628S) and the University of Hradec Kralove (No. SV2104-2021).

- [1] Malinak D., Korabecny J., Soukup O., Gorecki L., Nepovimova E., Psocka M., Dolezal R., Nguyen T.D., Mezeiova E., Musilek K., Kuca K., *Current Organic Chemistry*, 22, 16, (2018).
- [2] Sakurada K., Matsubara K., Shimizu K., Shiono H., Seta Y. Tsuge K., Yoshino M., Sakai I., Mukoyama H., Takatori H., *Neurochemical Research*, 28, 1401, (2003).
- [3] Loudet A., Burgess K., *Chem. Rev.*, 107, 4891, (2007).

4Po42

SYNTHESIS OF STATIC-CARBOXAMIDES AS POTENTIAL STAT3 INHIBITORS

Miroslav Psocka¹, David Malinak¹, Rudolf Andrys¹, Jana Svobodova¹, Kamil Musilek¹, Milan Reinis²

¹University of Hradec Kralove, Faculty of Science, Department of Chemistry, Rokitanskeho 62, 500 03 Hradec Kralove, Czech Republic, miroslav.psocka@uhk.cz

²Laboratory of Immunological and Tumour Models, Institute of Molecular Genetics of the Czech Academy of Sciences, Videnska 1083, 142 20 Prague, Czech Republic.

Signal transducer and activator of transcription-3 (STAT3) is the most studied member of a family of seven latent cytoplasmic transcription factors (STATs 1-4, 5a, 5b and 6) that are closely associated with the occurrence in numerous types of cancer (breast, prostate, lung, ovarian, leukemia and lymphoma cancers). STAT3

contains four functional domains, from which the Src homology 2 domain (SH2 domain) is the main target for inhibition of these proteins that results in STAT3 tyrosine 705 (Y705) phosphorylation, dimerization, nuclear transport, DNA binding and transcription induction. The benzo[*b*]thiophene 1,1-dioxide (BTP) is crucial pharmacophore of many STAT3 inhibitors, such as Stattic, HJC0123, HJC0149 and HJC0416.^[1, 2, 3] Stattic (6-nitro derivate of BTP) is a small molecule with selective inhibition of STAT3 SH2 domain function *in vitro*^[3]. HJC0123, HJC0149 and HJC0416 are carboxamides made from 6-amino derivate of BTP and substituted aromatic carboxylic acids.^[1, 2] In this study we have designed, synthesized and purified new carboxamides to inhibit STAT3. Their physical chemical properties were predicted *in silico* and then experimentally evaluated. Their biological activity will be evaluated in human and murine cancer cell lines and compared to Stattic as a reference compound.

This work was supported by Ministry of Health of the Czech Republic (No. NV18-05-00562).

- [1] Chen, H. et al. *Eur. J. Med. Chem.* **2013**, 62, 498-507.
 [2] Chen, H. et al. *Eur. J. Med. Chem.* **2014**, 82, 195-203.
 [3] Zhang, W. et al. *Eur. J. Med. Chem.* **2017**, 125, 538-550.

4Po43 SYNTEZA BENZOTIAZOLOVÝCH ANALÓGOV BODIPY FARBÍV S KVADRUPOLÁRNOU D-Π-A-Π-D ŠTRUKTÚROU PRE BIOIMAGING

Maroš Smolíček¹, Jela Nociarová¹, Peter Hrobárik¹

¹Katedra Anorganickej Chémie, Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského, Ilkovičova 6, 841 04 Bratislava, marossmolicek@gmail.com

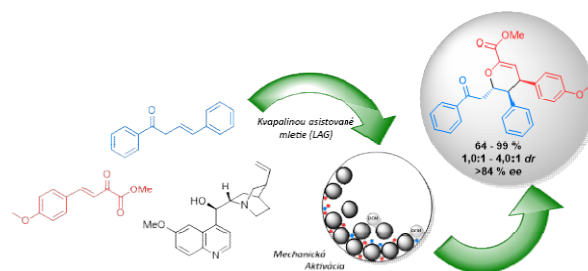
Bola pripravená séria 6,6-disubstituovaných bis(benzotiazol-2-yl)metánov a príslušných BODIPY farbív. Cieľové BODIPY farbivá vykazujú vysoké kvantové výťažky fluorescence (69-100%). Boli vyvinuté nové syntetické postupy na prípravu donorne C-6 substituovaných benzotiazolov v multigramovej škále a bola pripravená séria nových benzotiazolových BODIPY farbív s atómom fluóru substituovaným metoxy a kyano-skupinami, pričom jedna z týchto zlúčenín vykazovala kvantitatívny kvantový výťažok aj vo vodnom roztoku (H₂O/DMSO – 100/1).

4Po44 VYUŽITIE CHINÍNU A MECHANICKEJ AKTIVÁCIE V ASYMETRICKEJ DIENOLÁTOVEJ OXA-DIELSOVEJ- ALDEROVEJ REAKCII S OBRÁTENÝMI ELEKTRÓNOVÝMI POŽIADAVKAMI

Klára Stankovianska¹, Tibor Peňaška¹, Radovan Šebesta¹

¹Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra organickej chémie, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovenská republika;
klara.stankovianska@gmail.com;
tibor.penaska@uniba.sk; radovan.sebesta@uniba.sk

Asymetrická oxa-Dielsova-Alderova reakcia s obrátenými elektrónovými požiadavkami (IEDDA) je organická chemická reakcia, pri ktorej vzniká šesťčlenný kruh [1]. Produkty asymetrických IEDDA reakcií ketónov a ketoesterov vykazujú významnú biologickú aktivitu a práve preto je tento syntetický prístup v súčasnosti veľmi študovanou problematikou [2]. Práca je zameraná na štúdium asymetrickej oxa-IEDDA reakcie ketoesterov s β,γ-nenasýtenými ketónmi prostredníctvom tvorby dienolátov s použitím chinínu ako organokatalyzátora v podmienkach mechanickej aktivácie v guľovom mlyne. Reakcia poskytla rôzne typy dihydro-pyránov s tromi novými stereogénnymi centrami v dobrom výťažku (64 – 99 %) s diastereo-selektivitou 4,0:1 *dr* a s enantioselektivitou až 84 % *ee*.



Práca vznikla za podpory Vedeckej grantovej agentúry VEGA, projekt č. 1/0332/19.

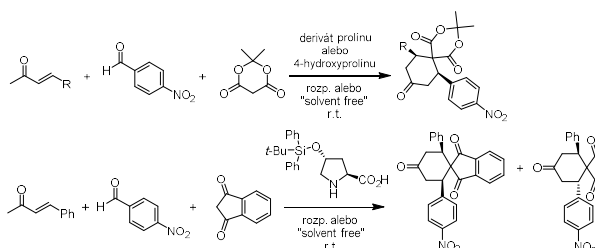
- [1] Xie, M.; Lin, L.; Feng, X. *Chem. Rec.* **17**, 2 (2017).
 [2] Li, X.; Kong, X.; Yang, S.; Meng, M.; Zhan, Z.; Zeng, M.; Fang, X. *Org. Lett.* **21**, 1979 (2019).

4Po45 ŠTÚDIUM ORGANOKATALYTICKEJ TROJKOMPONENTNEJ KNOEVENAGELOVEJ/DIELSOVEJ- ALDEROVEJ REAKCIE

Henrich Szabados¹, Eva Veverková¹, Radovan Šebesta¹

¹Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského v Bratislave, Katedra Organickej chémie, Ilkovičova 6, 841 04 Bratislava-Karlova Ves (szabados6@uniba.sk)

Spirocyclické ketóny sú atraktívne intermediáty v syntéze prírodných produktov a v medicínskej chémii [1]. Slúžia ako východiskové látky v syntéze exotických aminokyselín, ktoré sa využívajú na modifikáciu fyzikálnych vlastností a biologickej aktivity peptidov a proteínov [2]. Asymetrickou domino Knoevenagelovou/Dielsovou-Alderovou reakciou katalyzovanou chirálnymi amínmi je možné z jednoduchých a komerčne dostupných východiskových zlúčenín pripraviť chirálne spirocyclické ketóny [3,4]. Naším zameraním bola Knoevenagelova/Dielsova-Alderova reakcia v organických rozpúšťadlách, vo vode a v „solvent-free“ podmienkach guľového mlynu. Na reakcii s kyselinou Meldrumovou bola testovaná paleta katalyzátorov odvodených od prolínu a 4-hydroxyprolínu ako napríklad sulfonylamidy alebo silylétery s objemnými substituentami. Tercbutylsilyléterové deriváty od 4-hydroxyprolínu sa ukázali byť ako najúčinnšie katalyzátory a v reakcii s 1,3-indandiónom poskytli 87-99% *ee anti* izoméru vo vodnom prostredí a v podmienkach guľového mlynu.



Práca vznikla s podporou Vedeckej grantovej agentúry VEGA, projekt č. 1/0332/19.

- [1] Xiang, J. N.; Nambi, P.; Ohlstein, E. H.; Elliott, J. D. *Bioorg. Med. Chem.* **6**, 695-700 (1998).
- [2] Zitsane, D. R.; Ravinya, I. T.; Riikure, I. A.; Tetera, Z. F.; Gadrinetse, E. Y.; Kalei, U. O. *Russ. J. Org. Chem.* **36**, 496 (2000).
- [3] Ramachary, D. B.; Chowdari, N. S.; Barbas, C. F. III *Angew. Chem. Int. Ed.* **42**, 4233-4237 (2003).
- [4] Ramachary, D. B.; Chowdari, N. S.; Anebouselvy, K.; Barbas, C. F. III *J. Org. Chem.* **69**, 5838-5849 (2004).

4Po46 N-PHENYLPUTRESCINE AND ITS DERIVATIVES: PREPARATION AND BIOCATALYTIC APPLICATION AS NATURAL PRODUCT INSPIRED AMINE DONORS

Mária Štiblariková¹, Catherine A. McKenna², Irene De Silvestro³, Dominic J. Campopiano², Andrew L. Lawrence²

¹Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava, Slovak Republic, maria.stiblarikova@stuba.sk

²EaStCHEM School of Chemistry, University of Edinburgh, Joseph Black Building, David Brewster Road, Edinburgh, EH9 3FJ, U.K

³Procter and Gamble, Temselaan 100, 1853 Grimbergen, Belgium

The enantioselective synthesis of chiral amines is one of the key reactions in applied chemical synthesis. A biocatalytic approach of converting ketones to chiral amines in exceptional enantioselectivity using transaminase (TA) enzymes is a greener and more sustainable alternative to the methods currently used in industrial chemistry. However, the use of TA enzymes can be severely limited by the thermodynamically unfavourable amine donor/acceptor equilibrium [1]. *N*-phenylputrescine (NPP) represents a readily accessible amine donor, which displays excellent activity across an unprecedented range of pH and temperatures with both wild-type and commercially available, engineered TAs [2]. Furthermore, NPP displaces challenging transamination equilibrium by forming an insoluble dimer *via* a Povarov reaction, a process inspired by the biosynthesis of dipyrroloquinoline alkaloids [3]. The large-scale synthesis of NPP was optimized to prepare this amine donor in two reaction steps on up to 30 g scale in >80% yield. NPP was obtained as a hydrochloride salt, which is easy to handle and can be stored under ambient conditions with no special precautions required. To further explore the potential of using such an amine donor, an array of NPP derivatives was prepared. The aromatic system was functionalised with various electron accepting and withdrawing groups and the length of aliphatic chain was altered.

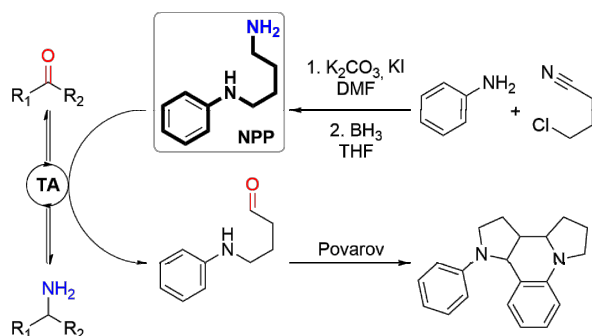


Fig. 1 Synthesis and application of NPP in biocatalytic transamination.

The authors would like to gratefully thank VEGA project No. 1/0552/18, National Scholarship Programme of the Slovak Republic and EPSRC Centre for Doctoral Training in Critical Resource Catalysis (CRITICAT, EP/L016419/1).

- [1] Kohls H., Steffen-Munsberg F., Höhne M.: *Curr. Opin. Chem. Biol.* 19, 180–192 (2014).
- [2] McKenna C., Štiblariková M., De Silvestro I., Campopiano D., Lawrence A.: *N-Phenylputrescine (NPP): A Natural Product Inspired Amine Donor for Biocatalysis: ChemRxiv*; This content is a preprint and has not been peer-reviewed (2021).
- [3] Brown P. D.; Willis A. C.; Sherburn M. S.; Lawrence A. L.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 52, 13273–13275 (2013).

4Po47 PREPARATION OF *E* ISOMERS OF HYDRAZONES AND ANIL-LIKE COMPOUNDS BY THERMALLY STIMULATED ISOMERIZATION OF *Z* ISOMERS OF ANIONS

Pavol Tisovský¹, Jana Donovalová¹, Anton Gáplovský¹

¹Department of Organic Chemistry Faculty of Natural Sciences, Comenius University Ilkovičova 6, SK-842 15 Bratislava, Slovakia, pavol.tisovsky@uniba.sk

A new, simple method for the preparation of *E*-isomers of hydrazones and anil-like compounds from *Z*-isomers of these compounds in the presence of TBAF or TBAA has been developed. The *Z*-isomers in the presence of bases (TBAF or TBAA) form stable *N* anions of hydrazones. These *Z*-anions of hydrazones and anil-like compounds already quantitatively isomerize at room temperature to stable *E*-isomers of the *N* anions of hydrazones, which tautomerize. In the protic medium, the anion of the *E*-isomer changes immediately quantitatively to the *E*-isomer of the corresponding nonanionic compound.

This study was financially supported by Slovak Grant Agency for Science (VEGA Project 1/0618/19).

4Po48 NEW CARBOHYDRATE-DERIVED ORGANOCATALYST FOR ASYMMETRIC MICHAEL REACTION

Monika Tvrdoňová¹, Róbert Rončák¹, Jozef Gonda¹

¹Department of Organic Chemistry, Institute of Chemistry, Faculty of Science, P. J. Šafárik University, Moyzesova 11, 040 01 Košice, monika.tvrdonova@upjs.sk

Even though a variety of organic molecules was successfully tested as a catalyst for chemical reactions, searching for a new organocatalyst remains challenging. Modified amino acids, cinchona-derived structures, or urea/thiourea hydrogen bonding donors belong to the class of very efficient catalysts with high level of stereocontrol [1, 2]. Carbohydrates with its conformationally stable chiral scaffold and well-defined stereochemistry may also have a beneficial effect on the catalytic activity. We designed and synthesized a set of carbohydrate-derived molecules bearing amino acid (proline, tryptophan, tyrosine and phenylalanine), dipeptide or cinchona alkaloid linked through amide or thiourea linker (Figure 1). Prepared structures were examined as organocatalysts for the model asymmetric Michael addition of an acetylacetone to *trans*- β -nitrostyrene. Thiourea-based catalysts bearing cinchona part revealed the highest efficiency from all tested molecules and provided high yields and excellent enantioselectivities in studied reactions [3]. Molecules containing tryptophan in the structure have shown significant inhibition of HEWL amyloid fibril formation.

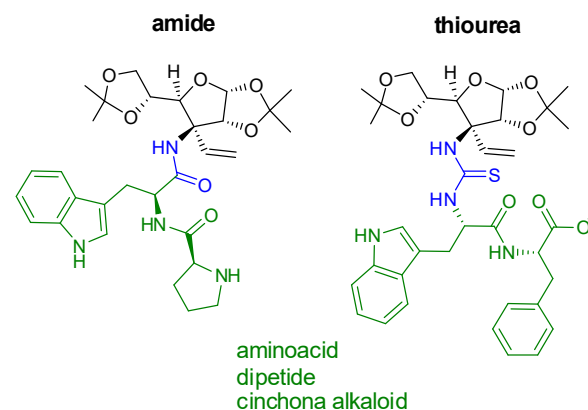


Fig. 1 Examples of amide- and thiourea-based catalysts.

The present work was financially supported by the Slovak Grant Agency VEGA (1/0375/19) and by the Slovak Research and Development Agency (APVV-14-0883). We would like to thank B. Spodniaková and Z. Bednáriková from Institute of Experimental Physics, Slovak Academy of Sciences for biological activity studies.

- [1] Davie, E.A., Mennen, S.M., Xu, Y., Miller, S.J.: *Chem. Rev.* **107**, 5759 (2007).
 [2] Agirre, M., Arrieta, A., Arrastia, I., Cossío, F.P.: *Chem. Asian J.* **14**, 44 (2019).
 [3] Rončák, R., Tvrdoňová, M., Gonda, J., Elečko, J.: *Tetrahedron* **76**, 131339 (2020).

4Po49 SYNTEZA ANTIBIOTÍK S DUÁLNYM ÚČINKOM

Dominika Valachová¹, Pavol Jakubec,¹ Tomáš Malatinský¹

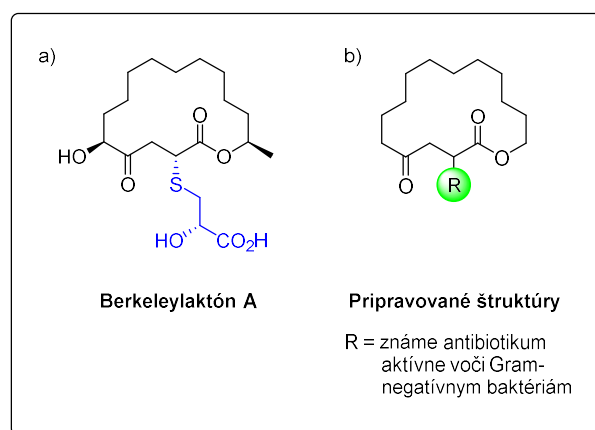
¹Oddelenie organickej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, dominika.valachova@stuba.sk

Čoraz naliehavším problémom súčasnej medicíny je vznik multirezistentných kmeňov baktérií, čo spolu so stagnujúcim vývojom nových tried antibiotík predstavuje príčinu vzniku krízy verejného zdravotníctva, ktorá sa podľa WHO bude v nasledujúcom období ešte stupňovať. Jednou z možných stratégií, ako spomaliť nástup rezistencie je syntéza hybridných antibiotík pozostávajúcich z najmenej dvoch samostatne účinných farmakofórov. Takéto liečivo má možnosť zasiahnuť dva rôzne bunkové ciele a pravdepodobnosť vzniku mechanizmu rezistencie voči obom liečivám súčasne je tým pádom znížená.

Vo vývoji nových farmaceutických preparátov ponúka inšpiráciu príroda, ktorá poskytuje nevyčerpateľné množstvo biologicky aktívnych substancií. Príkladom takejto látky je berkeleylaktón A (Obr. 1, časť a), izolovaný z jazera Berkeley Pit, ktorý vykazuje vysokú aktivitu voči MRSA (*Methiciline Resistant Staphylococcus Aureus*) [1]. Prvá totálna syntéza tohto prírodného antibiotika bola uskutočnená v našej výskumnej skupine [2]. Mechanizmus účinku berkeleylaktónu A doposiaľ nebol popísaný, avšak štúdie na analogických substrátoch ukazujú, že účinnou zložkou je nenasýtený konjugovaný makrocyclus, ktorý sa uvoľní retro-Michaelovou adíciou [3].

Cieľom súčasného výskumu je príprava série Michaelových aduktov komerčných širokospektrálnych antibiotík na nenasýtený

makrolaktón (Obr. 1, časť b). Tieto preparáty potenciálne predstavujú antibiotiká s duálnym mechanizmom účinku s aktivitou voči Gram-pozitívnym aj Gram-negatívnym baktériám, zároveň by ich jedinečný dvojité účinnok mohol obmedziť vznik bakteriálnej rezistencie.



Obr. 1 Berkeleylaktón A a navrhované duálne štruktúry

Prispevok vznikol s finančnou podporou grantových agentúr APVV (APVV-20-0298) a VEGA (VEGA1-0489-19).

- [1] Stierle, A. A.; Stierle, D. B.; Decato, D.; Priestley, N. D.; Alverson, J. B.; Hoody, J.; McGrath, K.; Klepacki, D.: *J. Nat. Prod.* **2018**, *80*, 1150–1160.
 [2] Ferko, B.; Zeman, M.; Formica, M.; Veselý, S.; Doháňošová, J.; Moncol, J.; Olejníková, P.; Berkeš, D.; Jakubec, P.; Dixon, D. J.; Caletková O.: *J. Org. Chem.* **2019**, *84*, 7159–7165.
 [3] Canova, S.; Lépine, R.; Thys, A.; Baron, A.; Roche, D.: *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2011**, *21* (16), 4768-4772.

4Po50 SULFONAMID-SALICYLALDEHYDOVÉ IMINY ÚČINNÉ PROTI STAFYLOKOKŮM REZISTENTNÍM NA METHICILIN A TRIMETHOPRIM

Martin Krátký¹, Klára Konečná¹, Ondřej Jand'ourek¹, Jana Maixnerová¹, Jarmila Vinšová¹

¹Univerzita Karlova, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Akademiya Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, vinsova@faf.cuni.cz

Sulfonamidy jsou známy svými antibakteriálními účinky po řadu let a sulfonamidová skupina je považována za univerzální farmakofor používaný ve farmaceutické chemii. Zavedená sulfonamidová léčiva včetně sulfamethoxazolu, kotrimoxazolu nebo sulfadiazinu vykazovala klinicky relevantní antimykobakteriální aktivitu [1]. Tento fakt inicioval přípravu dvaceti pěti

Schiffových bází získaných kombinácií těchto sulfonamidů a substituovaných salicylaldehydů a 5-nitrofurfuralu ke studiu jejich antibakteriální aktivity.

Připravené iminy byly testovány vůči gram-pozitivním kmenům: *Staphylococcus aureus* ATCC 29213, CCM 4223, methicilin-rezistentní *Staphylococcus aureus* ATCC 43300, CCM 4750, *Staphylococcus epidermidis* H 6966/08 (klinický izolát), *Enterococcus faecalis* ATCC 29212, CCM 4224 a gram-negativním kmenům: *Escherichia coli* ATCC 25922, CCM 3954, *Klebsiella pneumoniae* D 11750/08 (klinický izolát), *K. pneumoniae* J 14368/08 (klinický izolát) a *Pseudomonas aeruginosa* ATCC 27853, CCM 3955. Jako nejúčinnější antibakteriální látky byly nalezeny deriváty získané ze sulfamethazinu a 3,5-halogenovaných salicylaldehydů. Nejméně účinné deriváty byly podrobeny testům vůči methicilin a trimethoprim/sulfamethoxazol rezistentním gram-pozitivním kmenům s MIC od 3.91 μM ($\geq 2.39 \mu\text{g mL}^{-1}$).

Závěrem lze konstatovat, že naše sloučeniny inhibují MRSA a stafylokoky rezistentní na trimethoprim / sulfamethoxazol bez jakékoli zkřížené rezistence. Rezistence na kotrimoxazol znamená kompletní rezistenci na všechny sulfonamidy. Modifikace původních sulfonamidů na Schiffovy báze substituovaných salicylaldehydů změnila bakteriostatický účinek na baktericidní a zabránila tvorbě biofilmu.

Práce byla podpořena projekty Grantové agentury ČR, reg. č. 20-19638Y, Ministerstva zdravotnictví ČR, reg. č. NU21-05-00482, a EFSA-CDN (reg. č. CZ.02.1.01/0.0/0.0/16_019/0000841) spolufinancovaného Evropskou unií.

[1] Ameen SM, Drancourt M. In Vitro Susceptibility of *Mycobacterium tuberculosis* to Trimethoprim and Sulfonamides in France. *Antimicrob. Agents Chemother.* 57(12), 6370–6371 (2013).

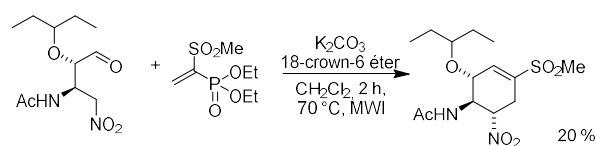
4Po51 SYNTEZA SÍRNEHO BIOIZOSTÉRU OSELTAMIVIRU

Barbora Zahradníková¹, Viktória Modrocká¹, Mária Mečiarová¹, Radovan Šebesta¹

¹ Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského v Bratislave, Katedra Organickej chémie, Ilkovičova 6, 841 04 Bratislava-Karlova Ves, zahradnikova6@uniba.sk

V posledných rokoch sa začali objavovať kmene vírusov chrípky rezistentné voči antivirálnym liečivám, najmä voči zanamiviru a oseltamiviru.

Rezistencia vírusov je spôsobená mutáciami v aktívnom mieste neuraminidázy – enzýmu, zodpovedného za replikáciu a infekčnosť vírusu, ako aj mimo aktívneho miesta enzýmu [1]. Tento poznatok viedol k snahe navrhnúť, predikovať a syntetizovať deriváty antivirálnych liečiv, ktoré by vykazovali biologickú aktivitu voči bežne vyskytujúcim sa ale aj mutantným kmeňom vírusu chrípky so zachovaním dobrých fyzikálno-chemických vlastností umožňujúcich ich orálne použitie. Jednou z možností ako zachovať, resp. zvýšiť biologickú účinnosť oseltamiviru voči mutáciám je derivatizácia karboxylovej skupiny. Využitie bioizostérie je vhodnou alternatívou na zlepšenie farmakokinetických vlastností a potenciálne aj aktivity liečiva. Bioizostéry sú zlúčeniny s rôznymi funkčnými skupinami, ktoré sú si podobné chemickými, fyzikálnymi, elektrónovými, konformačnými aj biologickými vlastnosťami. [2] S týmto cieľom bol navrhnutý a syntetizovaný sírny analóg bioizostéru oseltamiviru, u ktorého sa predpokladá vyššia inhibičná aktivita (obr. 1).



Obr. 1 Syntéza sírneho analógu oseltamiviru.

Túto prácu podporila Slovenská agentúra pre výskum a vývoj na základe grantu APVV-17-0239.

- [1] Hsieh, H.-P.; Hsu, J. T.-A.: *Curr. Pharm. Des.* 13, 3531 (2007).
[2] Hong, B.-T.; Cheng, Y.-S. E.; Cheng, T.-J.; Fang, J.-M. *Eur. J. Med. Chem.* 163, 710 (2019).

4Po52 SYNTHESIS AND BIOLOGICAL ACTIVITY OF NOVEL *N*⁶-SUBSTITUTED PURINE 2'- DEOXY-9(*B*)-D-RIBOSIDES

M. Zatloukal^a, V. Matušková^{a,b}, J. Voller^b, J. Grúz^b, K. Doležal^{a,b}, and M. Strnad^b

^aDpt. of Chem. Biology and Genetics, Centre of the Region Haná for Biotechnol. and Agricultural Research, Palacký University Olomouc, Czech Republic

^bLaboratory of Growth Regulators, The Czech Academy of Sciences, Institute of Experimental Botany & Palacký University, Olomouc, Czech Republic

Cytokinins are naturally occurring compounds acting as plant growth regulators and promote plant growth and development including shoots initiation, branching, apical dominance and leaf

senescence.^{1,2} They are divided into two main groups according to the type of substitution in the N^6 adenine position: isoprenoid and aromatic.³ Aromatic cytokinin 6-benzylaminopurine (BAP) has been widely used in micropropagation systems and biotechnology,⁴ however, its 9-glucoside (BAP9G) accumulates in the explant causing root inhibition and heterogeneity in growth.^{5,6,7} To overcome BAP disadvantages the series of variously ring-substituted BAP N^9 -2'-deoxy sugar derivatives were prepared and examined in different cytokinin bioassays (*Amaranthus*, senescence, and tobacco callus bioassays) for detailed study of cytokinin activity in comparison to free bases and ribosides. The ability of selected aromatic N^6 -substituted adenine-2'-deoxy-9(β)-d-ribosides to promote plant growth and delay senescence increased remarkably, and, as opposed to BAP, no loss of cytokinin activity at higher concentrations was observed. The presence of 2'-deoxyribose moiety at N^9 -position led to an increase in cytokinin activities in comparison to free bases and ribosides. Additionally, the antioxidant capacity of 2'-deoxy-9(β)-d-ribosides was also examined.

This work was supported from ERDF project "Development of pre-applied research in nanotechnology and biotechnology" (No. CZ.02.1.01/0.0/0.0/17_048/0007323).

Special thanks to Czech and Slovak Chemical Society for organizing the conference.

References

- [1] Mok D et al., *Annu Rev Plant Physiol Plant Mol Biol.* 2001;52:89–118
- [2] Haberer G et al., *J Plant Physiol.* 2002;128:354–362
- [3] Strnad M, *Physiol Plant.* 1997;101:674–688

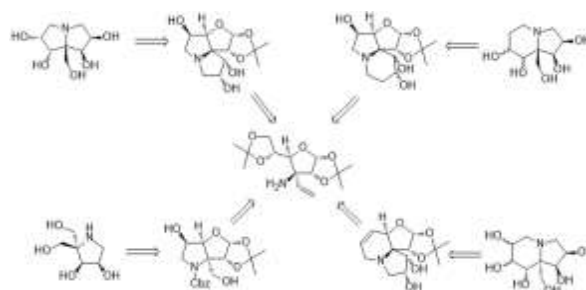
4Po53 SYNTHETIC ROUTE TO NOVEL POLYHYDROXYLATED PYRROLIDINE AND INDOLIZIDINE ALKALOIDS

Ján Elečko¹, Jozef Gonda¹

¹*Katedra organickej chémie, Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11, 040 01 Košice, jan.elecko@upjs.sk*

Iminosugars form a large group of polyhydroxylated cyclic alkaloids with structural resemblance to natural sugars but instead of endocyclic oxygen they contain basic nitrogen atom. Interest in these compounds arises from discovery of nojirimycin in 1966 due their ability to inhibit various sugar processing enzymes, including glycogenases and glycosyl transferases so they are tested for treatment of disorders such as diabetes mellitus, viral infections, cancer and sphingolipid metabolism disorders [1]. Due to promising biological activities a lot of syntheses of natural and non-natural iminosaccharides were made.

We report a synthetic route leading to novel unnatural polyhydroxylated pyrrolidine and indolizidine iminosugars starting from aminoderivate [2] prepared in high yield and stereoselectivity from D-glucose [3].



Obr. 1 Retrosynthesis

The present work was supported by the Slovak Grant Agency VEGA (1/0375/19) and by the Slovak Research and Development Agency (APVV-14-0883).

- [1] Asano, N., Nash R. J., Molyneux, R. J., Fleet G. W. J. *Tetrahedron: Asymmetry* 11, 1645 (2000).
- [2] Gonda, J., Elečko, J., Martinková, M., Fábian, M.: *Tetrahedron Letters* 57, 2895 (2016).
- [3] Gonda, J., Martinková, M., Raschmanová, J., Balentová, E.: *Tetrahedron: Asymmetry* 17, 1875 (2006).

POSTERY - SEKCIA 5 VYUČOVANIE A HISTÓRIA CHÉMIE

5Po01 VIDEODATABÁZE ŠKOLNÍCH CHEMICKÝCH POKUSŮ – BEDOX

Martin Bílek¹, Kateřina Chroustová¹, Martin Rusek¹,
Pavel Beneš¹, Petr Adolf Skřehot², Zdeněk Hon³,
Michaela Melicharová³

¹Pedagogická fakulta UK, M. Rettigové 4, 116 39
Praha 1, ²Znalecký ústav bezpečnosti a ochrany
zdraví, z.ú., Ostrovského 253/3, 150 00 Praha 5,
³Fakulta biomedicínského inženýrství ČVUT, nám.
Sítňá 3105, 272 01 Kladno 2,
martin.bilek@pedf.cuni.cz

Hlavním výsledkem projektu Technologické agentury ČR „Evaluace postupů pro bezpečnou praktickou výuku chemie ve školách – BEDOX“ zaměřeného na bezpečnou laboratorní praxi ve výuce chemie jako všeobecně vzdělávacího předmětu je vytvářena databáze ověřených návodů pro chemické pokusy opatřená jak informacemi o vhodnosti pokusu pro daný typ vzdělávání a o provázanosti s tématem učiva chemie, tak i s označením míry nebezpečnosti pokusu spolu s doporučenými ochrannými pomůckami, s doporučenou manipulací s příslušnými látkami či s likvidací odpadů. Videozáznamy více než stovky chemických pokusů zařazených v databázi jsou doplněny také komentářem z didakticko-chemického hlediska, tj. vysvětlením podstaty pokusu, ověřením správného provedení pokusu a jeho praktickými souvislostmi. Výběr a zpracování pokusů proběhlo také na základě získaných názorů a zkušeností učitelů ze základních škol a gymnázií [1] a s podporou aktuálně legislativně upravené bezpečné a didakticky ověřené laboratorní praxe [2]. Databáze je postupně připravována na webové stránce www.ebedox.cz.

Příspěvek vznikl s podporou projektu Technologické agentury ČR č. TL02000226.

- [1] Bílek, M., Chroustová, K., Rusek, M., Beneš P., Skřehot, P. A., Hon, Z., Melicharová, M.: *Czech. Chem. Soc. Symp. Ser. 18*, 57 – 248 (2020)
[2] Skřehot, P. A., Marek, J., Ptáčková, V., Bílek, M., Beneš, P., Rusek, M., Chroustová, K., Hon, Z., Melicharová, M.: *Czech. Chem. Soc. Symp. Ser. 18*, 57 – 248 (2020).

5Po02 SBÍRKY VZOROVÝCH KOMPLEXŮ VYUŽITELNÉ VE VÝUCE CHEMIE KOORDINAČNÍCH SLOUČENIN

Bohuslav Drahoš¹, Radim Masař¹

¹Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta,
Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12,
779 00, Olomouc, bohuslav.drahos@upol.cz

Problematicke výuky koordinační chemie na středních nebo vysokých školách nebývá věnována dostatečná pozornost. Postavení koordinační chemie v Rámcově vzdělávacím programu pro gymnázia (ČR) není konkrétně ukotveno a hloubka učiva bývá formulována až v jednotlivých školních vzdělávacích programech. Výuka koordinační chemie na gymnáziích bývá často zaměřena na názvosloví a žákům může chybět konkrétní představa, jak koordinační sloučeniny vypadají a jaké mají vlastnosti či praktické využití. Cílem této práce proto bylo zjistit, jaký rozsah je věnován tématu koordinační chemie ve vybraných středoškolských učebnicích, formou dotazníkového šetření zjistit rozsah znalostí a oblibu koordinační chemie na vybraných středních školách, a připravit fyzickou sbírku komplexních sloučenin vybraných kovů 4. periody (Cr^{III}, Mn^{III}, Fe^{III}, Co^{III}, Ni^{II}, Cu^{II}, Zn^{II}) s oxalátovými nebo kyanidovými ligandy, která by demonstrovala jejich vlastnosti a sloužila tak jako didaktická pomůcka při výuce koordinační chemie jak na střední, tak i vysoké škole. V rámci tohoto příspěvku budou detailně prezentovány zjištěné výsledky a možnosti využití vyrobené didaktické pomůcky v rámci výuky koordinační chemie.



Obr. 1 Fotografie dvou připravených sérií oxalátokomplexů (nahore) a kyanidokomplexů (dole) zpracovaných do podoby didaktické pomůcky (centrální atom se mění zleva doprava: Cr^{III}, Mn^{III}, Fe^{III}, Co^{III}, Ni^{II}, Cu^{II}, Zn^{II}) – magneticky připevněné vialky doplněné vzorcem a názvem dané sloučeniny.

5Po03**REAKCE ANILINU A JEHO DERIVÁTŮ S KYSELINOU MRAVENČÍ BEZ ROZPOUŠTĚDLA V PŘÍTOMNOSTI MIKROVLN JAKO VÝUKOVÝ EXPERIMENT - VLIV SUBSTITUENTU V MOLEKULE ANILINU**Michael Mycak¹, Karel Kolář², Martin Bílek²¹Gymnázium Dr. Emila Holuba, Na Mušce 1110, 534 01 Holice, ²Pedagogická fakulta UK, Magdalény Rettigové 4, 116 39 Praha, karel.kolar@pedf.cuni.cz

V oblasti chemického vzdělávání je vhodné upozornit na rozmanitost postupů, používaných při syntéze organických sloučenin. Jedním z takových příkladů jsou reakce prováděné bez rozpouštědla v přítomnosti mikrovln. V této souvislosti jsme se zabývali obzvláště syntézou amidů. Jedním z aspektů výukových experimentů byl vliv struktury reaktantů na průběh reakce a její výtěžek. V našem případě jsme se zaměřili na prezentaci vlivu struktury anilinu a jeho derivátů na průběh reakce s kyselinou mravenčí. Z výsledku experimentů vyplývá, že výtěžek reakce roste s rostoucí bazicitou aminu v řadě: 4-nitroanilin < 4-chloranilin < anilin < 4-methoxyanilin v souladu s předpoklady. Soubor reakcí, prováděných v komerční mikrovlnné troubě je určen pro praktická cvičení na vysokých školách, vzdělávajících budoucí učitele a v rámci workshopů pro zájemce z řad studentů gymnázií.

Autoři děkují za podporu projektu „Progres Q17 Příprava učitele a učitelská profese v kontextu vědy a výzkumu“ Pedagogické fakulty Univerzity Karlovy.

- [1] Šauliová, J.: *Chemické listy*, 96, 761 (2002)
 [2] Čermák, J., Barešová, A., Dostál, H., Myška, K., Kolář, K.: Syntéza amidů v přítomnosti mikrovln. In: *Súčasnosť a perspektívy didaktiky chémie II*. FPV UMB, Banská Bystrica 2009, s. 143-145
 [3] Mlejnek, T., Myška, K., Kolář, K.: Microwave assisted solvent free synthesis of benzamides as school experiment - effect of substituent in benzoic acid. In: *Teaching of Science Subjects in Higher and Highest Education*. Pedagogical University, Cracow 2016, p. 143 - 151

5Po04**PRAKTICKÉ VYUŽITÍ ONLINE NÁSTROJŮ VE VÝUCE CHEMIE**Michal Lach¹, Kateřina Trčková¹¹Ostravská univerzita, Přírodovědecká fakulta, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava, Česká republika, P20024@student.osu.cz, katerina.trckova@osu.cz

Tento příspěvek reaguje na aktuální situaci a distanční výuku ve školách. Kromě pedago-

gických dovedností jsou pro učitele v současné době zásadní i ICT dovednosti. Z tohoto důvodu považujeme za nutné integrovat online nástroje do pregraduální přípravy učitelů chemie.

Cílem tohoto příspěvku bylo prakticky ověřit a vybrat vhodné freewarové a sharewarové aplikace pro výuku chemie a následně je začlenit do jednotlivých fází vyučovacího procesu. Ve fázi motivační a fixační lze použít grafické nástroje Canva, PhotoFunia nebo PicCollage, aplikace na přípravu vlastních výukových modulů Wordwall, LearningApps, TOGlic, popř. již připravené kvízy. Do fáze expoziční je vhodné zařadit aplikace Periodická soustava prvků, WordArt, MindMup. Do fáze diagnostické lze zařadit Kahoot!, Quizizz, Socrative.

Používání mobilních aplikací ve výuce má obrovský potenciál: zlepšuje motivaci a učení studentů. Žáci mohou aplikace používat jak ve třídě, tak ve svém volném čase pro učení nebo kontrolu [1]. Mobilní aplikace se podílejí na rozvoji klíčových kompetencí žáků: komunikativní, řešení problémů, sociální a personální. Aplikace lze přizpůsobit různým stylům učení, umožňují žákům pracovat vlastním tempem a objevovat taková řešení, která odpovídají jejich schopnostem a možnostem. Jedná se o efektivní nástroje, které napomáhají vizualizaci a upevnění pojmů [2], které lze prakticky používat v synchronní online výuce i v tradiční výuce.

Tato práce vznikla za podpory projektu SGS13/PřF/2021, *Inovativní metody v distanční výuce chemie*

- [1] Vernes, A., Navarro, C., Álvarez-Campos, P.: *Mobile learning applications to improve invertebrate zoology online teaching*. *Invertebrate Biology* 140, 1 (2021).
 [2] Ewais, A., Hodrob, R., Marree M. Jaradat, S. *Mobile Learning Application for Helping Pupils in Learning Chemistry*. *International Journal of Interactive Mobile Technologies* 15, 1 (2021).

5Po05**MOBILNÍ A WEBOVÁ APLIKACE EMIL NEJEN PRO STUDENTY NA VŠCHT**Tomáš Mládek¹, Ondřej Ruml¹¹Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 6, 16628, Praha 6, cis-support@vscht.cz

Webová a mobilní aplikace EMIL nadále poskytuje studentům Vysoké školy chemicko-technologické v Praze aktuální informace o studiu, a pomáhá jim s nelehkým úkolem přeorientování se ze střední školy na život na

vysoké škole. Za svojí více než tříletou existenci prošla několika výraznými změnami, a přibyly v ní další funkce klíčové pro usnadnění zdárného dokončení studia, týkajících se např. zápisu na zkoušky, celoškolních kalendářů, či informací o dostupné literatuře. Zároveň bylo prohloubeno již existující navázání na informační systémy VŠCHT Praha, a relevantní funkce byly

zpřístupněny i pro zaměstnance, jmenovitě např. Jídelníčky či oznámení o důležitých událostech a koronavirových opatřeních.

POSTERY - SEKCIA 6
APLIKOVANÁ CHÉMIA, ŽIVOTNÉ
PROSTREDIE A POLYMÉRY

6Po01

TRANSCRIPTOMIC AND PROTEOMIC ANALYSIS OF DROUGHT STRESS RESPONSE IN FIRST WEEKS OF GERMINATION OF OPIUM POPPY PLANTS

Kristýna Kundrátová¹, Martin Bartas¹, Petr Pečinka¹, Ondřej Hejna², Vladislav Čurn², Jiří Červen¹

¹*Department of Biology and Ecology, Faculty of Science, University of Ostrava, Ostrava, 710 00, Czech Republic; tynakundrat@post.cz (K.K.); martin.bartas@osu.cz (M.B.); petr.pecinka@osu.cz (P.P.); jiri.cerven@osu.cz (J.C.);*

²*Department of Genetics and Agricultural Biotechnology, Faculty of Agriculture, University of South Bohemia, Studentska 1668, 370 05 Ceske Budejovice, Czech Republic; churn@zf.jcu.cz*

Drought stress in plants is an essential field of research due to ongoing global climate changes and increasing water deficit in various locations on Earth. Most of the research done so far is focused on model plants and/or economically important crops. In this research, we have carried out a complex transcriptomic and proteomic analysis of two varieties of *Papaver somniferum* (opium poppy) with contrasting phenotypic responses to drought stress. Poppy was chosen as a non-model plant species for drought stress response. We have identified a key group of genes with significantly increased expression under drought stress conditions. In addition to expected genes (heat shock protein family genes, etc.), other surprising genes and proteins have been found to be significantly differentially expressed. Most of these genes were not stimulated in the sensitive genotype and our results show a different response at the level of gene expression in plants with a different phenotypic response to abiotic/drought stress. The future study will focus on the detailed analysis of key genes and the development of selection markers.

This research was funded by Ministry of Agriculture of the Czech Republic, grant number QK1810391, by University of South Bohemia GAJU027/2019/Z, and by University of Ostrava, SGS01/PřF/2020. CIISB, Instruct-CZ Centre of Instruct-ERIC EU consortium,

funded by MEYS CR infrastructure project LM2018127, is gratefully acknowledged for the financial support of the measurements at the CEITEC Proteomics Core Facility.

6Po02

ADSORPCE ANTIBIOTIK Z VODNÉHO PROSTŘEDÍ NA AKTIVNÍ UHLÍ NA BÁZI BIOMASY

Jan Bednárek¹, Ivan Koutník^{1,2}, Lenka Matějová¹, Gerardo Juan Francisco Cruz³

¹*VŠB-Technická univerzita Ostrava, CEET, Institut environmentálních technologií, 17. listopadu 15, CZ-70800 Ostrava-Poruba, Česká republika*

²*VŠB-Technická univerzita Ostrava, CEET, Fakulta materiállově-technologická, 17. listopadu 15, CZ-70800 Ostrava-Poruba, Česká republika*

³*Universidad Nacional de Tumbes, Facultad de Ciencias Agrarias, Departamento de Ingeniería Forestal y Gestión Ambiental, Ciudad Universitario s/n Pampa Grande, Tumbes, Perú.*

Od objevu penicilinu Sirem Alexanderem Flemिंगem se antibiotika postupně stala nedílnou součástí našeho života. Jedná se o látky, které usmrcují některé mikroorganismy nebo alespoň brání v jejich růstu. Bohužel, ruku v ruce s jejich stále masivnějším využíváním se antibiotika začala dostávat do životního prostředí, včetně odpadních a povrchových vod. Navíc tyto látky nelze úplně odstranit konvenčními metodami čištění odpadních vod. Přítomnost antibiotik ve vodném prostředí má nejen devastující vliv na vodní organismy, navíc může přispívat ke stále významnější hrozbě v podobě rezistence bakterií vůči antibiotikům.

Antibiotika lze dle chemické struktury rozdělit do několika tříd. Jednou z nich jsou fluorochinolony, jejichž struktura je odvozena od 4-chinolonu a které navíc obsahují, oproti jiným chinolonům, atom fluoru. Práce se zabývá adsorpcí dvou fluorochinolonových antibiotik – norfloxacinu a ofloxacinu – na různé vzorky aktivního uhlí. Nejvyšší adsorpční účinnost byla pozorována u vzorku na bázi mombínu červeného (RMS), její hodnota byla 459 mg/g u norfloxacinu a 406 mg/g u ofloxacinu.

Tato práce vznikla za podpory projektu Institut environmentálních technologií - excelentní výzkum reg. č.: CZ.02.1.01/0.0/0.0/16_019/0000853 financovaného z EFRR.

„Experimentální výsledky byly získány s využitím velké výzkumné infrastruktury ENREGAT podporované MŠMT, č. projektu LM2018098.“

6Po03**INTERAKCE EUROPIA S CEMENTOVÝMI MATERIÁLY V PŘÍTOMNOSTI ORGANICKÝCH LÁTEK**Marta Burešová¹, Barbora Drtinová¹, Jana Kittnerová¹¹Katedra jaderné chemie, ČVUT FJFI, Břehová 7, Praha 1, 115 19, buresma8@fffi.cvut.cz

Pro hodnocení bezpečnosti přípovrchových úložišť radioaktivních odpadů a hlubinného úložiště vyhořelého jaderného paliva je nutné popsat chování radionuklidů, které budou v uložitích přítomny. Mezi tyto radionuklidy patří např. europium. Migrace radionuklidů je ovlivněna sorpcí na materiál inženýrských bariér úložišť, mezi které patří také bariéry na bázi cementu. Konkrétně se jedná o výplň sudů nízko a středně aktivních odpadů a betonkontejner. Sorpce radionuklidu je popsána distribučním poměrem (R_d) mezi kapalnou a pevnou fází (L/S) nebo sorpční izotermou.

K experimentům byla použita hydratovaná cementová pasta typu CEM I. Byly provedeny vsádkové sorpční experimenty s ¹⁵²Eu v beznosičovém uspořádání s koncentrací Eu $1,7 \cdot 10^{-6}$ mol/La s různými poměry kapalně a pevné fáze (L/S 100–1000 L/kg). Kapalnou fází byl nasycený roztok Ca(OH)₂. Studovaným parametrem byl také vliv přítomnosti organických látek (kyselina adipová, kyselina ftalová, EDTA) o koncentraci $5 \cdot 10^{-3}$ mol/L. Byly vyhodnoceny distribuční poměry a sorpční izotermy. Stanovené hodnoty R_d sorpce Eu byly v řádu 10^4 L/kg pro všechna prostředí. Porovnáním hodnot bylo zjištěno, že bez přítomnosti organických látek jsou R_d vyšší, než v přítomnosti kyseliny adipové, ale nižší než v přítomnosti kyseliny ftalové a EDTA (v systému s EDTA byly R_d nejvyšší).

Výzkum vedoucí k těmto výsledkům byl financován z programu Evropské unie pro výzkum a inovace Horizont 2020 na základě grantové dohody č. 847593(EURAD-CORI). Výstup byl vytvořen za finanční účasti SÚRAO (SO2020-017). Tato práce vznikla také v rámci grantu Studentské grantové soutěže ČVUT č. SGS19/193OHK4/3T/14.

6Po04**ROLE REFRAKTIVNÍHO UHLÍKU V ADSORPČNÍCH VLASTNOSTECH PŮD**František Bůzek¹, Bohuslava Čejková¹, Ivana Jačková¹ a Barbora Doušová²¹Česká geologická služba, Geologická 6, 152 00 Praha 5, ČR, bohuslava.cejkova@geology.cz.²Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, ČR

Při studiu adsorpčních interakcí městských půd s kontaminanty jsme určovali zastoupení refraktivního uhlíku (black carbon) v celkovém půdním uhlíku. Ze standardních půd (LUFA Speyer, Germany) a experimentálních půd z městských aglomerací byl odstraněn karbonát rozpuštěním v kyselině a oxidovatelné formy uhlíku byly odstraněny žíháním při 375° (24 h) [1]. Původ a zastoupení uhlíku byly stanovovány z hodnot obsahu izotopů uhlíku ¹³C v elementárním analyzátoru propojeném s izotopovým hmotnostním spektrometrem. Refraktivní uhlík tvoří cca 10 až 20 % půdního uhlíku, u sazí z automobilových spalin je to cca 10 %. Zastoupení refraktivního uhlíku v prachových částicích je okolo 5 % a jeho izotopové složení $\delta^{13}C$ se liší podle zdroje uhlíku (uhlí, ropné produkty, biologický materiál). Ačkoliv je podíl refraktivního uhlíku v prachových částicích nízký, můžeme jej detekovat ve svrchních půdách městských aglomerací.

Práce vznikla za podpory projektu Grantové agentury ČR č. 19-04682S.

[1] Gustafsson et al. Global Biogeochemical Cycles 15,881-890 (2001).

6Po05**NANOPARTICLE POWDERS OBTAINED BY DIFFERENT DRYING TECHNIQUES**Kahynna C. Loureiro¹, Alessandro Jager¹, Eliezer Jager¹, Martin Hruby¹¹Institute of Macromolecular Chemistry, Czech Academy of Sciences, Heyrovského nám. 2, 162 06 Prague 6, Czech Republic, kahynna@live.com

Polymer nanoparticles are widely developed and used for different approaches. However, they often show some limitations in physicochemical stability which hinders scaling-up and effective translation to the clinics. In this context drying techniques like freeze-drying and spray-drying have been used to produce solid formulations of polymer nanoparticles concomitantly with drying protectants to increase their stability. According

to this we evaluated the capabilities of both techniques on the production of powders from polymer nanoparticles of poly(D,L-lactide-co-glycolide) (PLGA). Powder samples were prepared using D-trehalose and D-lactose and characterized using dynamic light scattering (DLS) and scanning electron microscopy (SEM). The samples prepared by spray-drying resulted in transparent solutions after water resuspension and analyzed by DLS shows the original distribution of hydrodynamic sizes in comparison to the freeze-dried samples. The SEM images of the dry powders corroborated with the DLS measurements and shows a spherical in shape and homogeneously distributed when prepared by spray-drying. Thus, spray-drying technique produce more stable PLGA nanoparticles powder in comparison to the freeze-drying technique

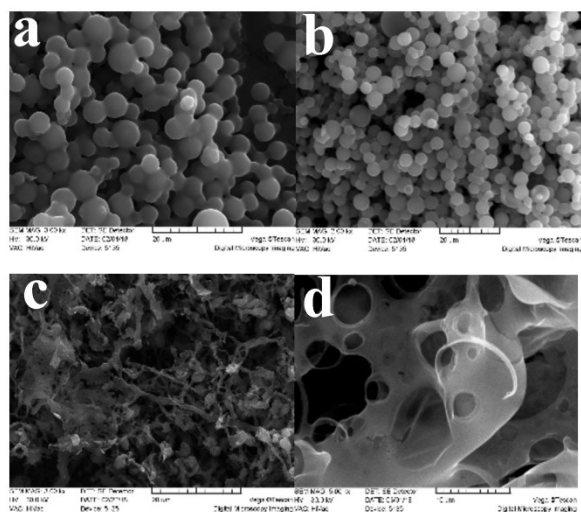


Fig. 1 SEM of the nanoparticles dried by spray (a,b) and freeze (c,d) drying processes, with trehalose (a, c) and lactose (b, d).

Financial support from the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (grant # LM2015064 ERIC) is gratefully acknowledged.

6Po06

POLY(2-METHYL-2-OXAZOLINE)-B-POLY[2-(DIISOPROPYLAMINO)ETHYL METHACRYLATE] BASED NANOPLATFORM FOR BIOMEDICAL APPLICATIONS

Peter Černochoch¹, Alessandro Jager¹, Zulfiya Černochochová¹, Vladimír Sincari¹, Lindomar J. C. Albuquerque², Rafal Konefal¹, Ewa Pavlova¹, Fernando C. Giacomelli², Eliezer Jager¹

¹ Institute of Macromolecular Chemistry, Czech Academy of Sciences, Heyrovský Sq. 2, 16206 Prague, Czech Republic; cernochoch@imc.cas.cz

² Centro de Ciências Naturais e Humanas, Universidade Federal do ABC, Santo André 09210-580, Brazil

Novel, amphiphilic block copolymers based on the water-soluble poly(2-methyl-2-oxazoline) (PMeOx) block linked to the hydrophilic – hydrophobic pH-responsive block of poly[2-(diisopropylamino)ethyl methacrylate] (PDPA) were prepared via the combination of living cationic ring-opening polymerization (CROP) and reversible addition-fragmentation chain transfer polymerization (RAFT) techniques.

Protein repelling properties of the PMeOx block together with pH-responsive behavior of the PDPA block linked together into diblock copolymer (BC) PMeOx-*b*-PDPA establish a huge potential for a new set of nanoplatforms potentially useful for tumor detection and therapy.

Nanoprecipitation in microfluidics device was therefore utilized to manufacture BC self-assemblies. In dependence on the total molecular weight of BC we were able to obtain either core-shell micelles (longer chains) or polymersomes (shorter chains). Further experiments also confer serum stability and pH-responsive behavior of the prepared nanoparticles, which are non-toxic even at fairly high polymer concentrations.

The authors gratefully acknowledge the Grant Agency of the Czech Republic, GAČR (grant 20-15479J) and FAPESP (grant 2019/06634-8) for financial support. L. J. C. A. acknowledges FAPESP (grants 2016/23844-8 and 2017/11261-0). A. J. and E. J. acknowledge the financial support from the Czech Science Foundation (grant no. 20-13946Y for A. J. and grant no. 20-15077Y for E. J.).

6Po07**ISOLATION AND CHARACTERIZATION OF *FUSARIUM SOLANI*: A NOVEL BISPHENOL A DEGRADING FUNGUS**

Jiri Cerven, Zuzana Rybkova, Katerina Malachova

Institute of Environmental Technologies / Department of Biology and Ecology, Faculty of Science, University of Ostrava, Chittussiho 10, 71000 Ostrava, Czech Republic, e-mail: jiri.cerven@osu.cz, zuzana.rybkova@osu.cz, katerina.malachova@osu.cz

Bisphenol A (BPA) is one of high-risk environmental contaminants due to its ability to mimic estrogenic hormones and thus affect the endocrine signalisation. A lot of work has been done in the field of BPA biodegradation, but only a handful of publications focus on degradation by fungi.

Aim of our work was to isolate new microbial strains capable of BPA biodegradation from heavily polluted sites. Using a culture enrichment method with BPA as sole carbon source we isolated 17 bacterial and 5 fungal strains. We have selected fastest growing strains based on the growth rate in mineral media containing BPA as sole carbon source and focused on best performing fungal strain, which was identified as *Fusarium solani*. In the environment-relevant conditions (low carbon concentration, Cu²⁺ contamination) the fungal strain was able to degrade 62 % of initial BPA in 24 days. Products of degradation were characterized using HPLC-MS.

All identified metabolites (hydroxy, methoxy and dimethoxy BPA) were found to be less toxic and having a lower estrogenic activity than BPA. Isolated *Fusarium solani* was also able to efficiently degrade several textile dyes, which shows the strain ability to degrade larger scale of pollutants, making the strain potentially useful in the field of biodegradation due to its ability to combine different biodegradation pathways (mitochondrial oxidation and extracellular enzymes).

6Po08**SCREENING OF COMMERCIAL ALCOHOL DEHYDROGENASES FOR BIOTRANSFORMATION OF ACETOPHENONE TO S-1-PHENYLETHANOL**

Hana Dobiasová^{1,2}, Patrícia Zuskáčová^{1,2}, Alžbeta Chochulová²

¹*Slovak University of Technology, Faculty of Chemical and Food Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, hana_dobiasova@stuba.sk*

²*Axxence Slovakia s. r. o., Radlinského 9, 812 37 Bratislava, hana.dobiasova@axxence.sk*

The olfactometric properties are important in the fragrance and flavour industry. S-1-phenylethanol (S-STOH) is a precursor for the production of S-1-styryllyl acetate, which is characterised by fresh strawberry and green odour. Chiral substances are sometimes defined by different aromas therefore, it is necessary to ensure desired enantiopurity of the final products [1].

Currently, STOH is prepared by the biotransformation of acetophenone, exploiting the enzymatic system of carrots. However, such approach is seasonal and highly dependent on external factors (weather, storage, etc.).

We aim to create a stable way of STOH production that will eliminate the impacts of external factors, increase productivity and be economically more efficient. The development of engineered enzymes has a potentially prohibitive price tag. Therefore, we screened nine preferentially S-selective alcohol dehydrogenases (ADHs) from the commercially available enzyme kit. ADHs can efficiently use isopropyl alcohol and acetone as co-substrates for reduction and oxidation, respectively, in a single enzyme system. The effects of enzymes, substrate and co-substrate concentration, a molar excess of co-substrate, acceptability of cofactors (NAD⁺, NADP⁺) on the enantiomeric excess and the concentration of STOH were studied in order to develop an industrially relevant and robust process.

Táto práca bola podporená Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APVV-17-0281.

[1] Mohamad I. Farbood, Robert W. Blocker, Joseph Arvizzigno, Ranya Muralidhara.: *United States Patent 6511686*, (2003).

6Po09

PŮDNÍ INDIKÁTORY ZNEČIŠTĚNÍ ANTIMONEM V MÍSTECH DOPRAVNÍCH UZLŮ

Barbora Doušová¹, Miloslav Lhotka¹, František Bůzek², Bohuslava Čejková², Iva Jačková², Eva Bedrnová¹

¹Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, ČR, dousovab@vscht.cz
²Česká geologická služba, Geologická 6, 152 00 Praha 5, ČR

V místech zatížených dopravou byla zaznamenaná vysoká koncentrace Sb v půdách i ovzduší. Více než polovina této kontaminace je důsledkem brzdění, neboť Sb₂S₃ se používá jako mazivo při výrobě brzdových destiček [1]. Intenzita a rychlost uvolňování Sb z otěru brzdových destiček do dvou odlišných typů standardních půd (Tab. 1) byla sledována v dlouhodobém loužicím experimentu. Zdrojový otěr byl vložen cca 1 cm pod povrch půdního sloupce, který byl pak saturován dest. H₂O na konstantní hodnotu 60-70 %.

Stabilita Sb v kontaminovaných půdách je dána uvolňováním dostupných forem Sb do půdního roztoku a současně adsorpcí rozpustných forem Sb k aktivním místům na povrchu půdních částic, přičemž dosažení rovnováhy je ovlivněno složením a texturními vlastnostmi půdy [2]. Písčité půda (2.1) s malým (S_{BET}) a nízkými hodnotami KVK a hydraulické capacity odváděla pouze jednotky % Sb ze zdrojového otěru, zatímco jílovitá půda (6S) s řádově vyššími hodnotami S_{BET} a KVK byla schopna za stejných podmínek uvolnit až 40% Sb. Kinetika loužení byla pro oba typy půd obdobná, množství uvolněného Sb dosáhlo maxima v prvních dnech experimentu, a během následujících 5 až 15 dní systém přešel do rovnováhy. Intenzita a doba maximálního loužení Sb závisela kromě půdních vlastností na intenzitě a frekvenci simulovaných srážek [3].

Tab. 1 Chemické složení, textura a povrchové vlastnosti standardních půd (LUFA Speyer, Germany)

| vlastnost/půda | 2.1 | 6S |
|---|--------------------|--------------------|
| N _{tot} (mg.g ⁻¹) | 0.5 | 2 |
| C _{org} (mg.g ⁻¹) | 6.5 | 16.4 |
| Fe (mg.g ⁻¹) | 11.3 | 106 |
| Sb (µg.g ⁻¹) | 2.1 | 3.2 |
| S _{BET} (m ² .g ⁻¹) | 1.9 | 42.5 |
| pH ^r | 5.1 | 7.1 |
| pH _{Zpc} | 3.7 | 6.5 |
| KVK (meq/100 g) ^r | 4.3 | 27.2 |
| Hydraulická kapacita (g/100g) ^r | 31.1 | 40.5 |
| Velikost částic (mm) podle USDA(%) ^r | <0.002 <0.05 <2.00 | <0.002 <0.05 <2.00 |
| | 4.1 9.3 86.6 | 41.2 35.5 23.3 |

^r) hodnoty deklarované LUFA Speyer

Práce vznikla za podpory projektu Grantové agentury ČR č. 19-04682S.

- [1] Iijima A. et al.: *Environ. Sci. Technol.* 42, 2937 (2008).
[2] Dousova B. et al.: *J. Hazard. Mater.* 307, 231-239 (2016).

- [3] Buzek F. et al.: *Appl. Geochem.* 33, 281-293 (2013).

6Po10

ODSTRAŇOVANIE CHLÓRBENZÉNU POMOCOU AKTÍVNEHO UHLIA A ŽELEZANU

Lucia Fašková¹, Daniela Pavúková¹, Ladislav Štibrányi¹, Ján Híveš¹

¹Oddelenie anorganickej technológie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, lucia.faskova@stuba.sk

Priemyselné odpadové vody obsahujú zvyšky mnohých znečisťujúcich látok, ktoré v predošlom procese čistenia odpadovej vody neboli úplne odstránené, prípadne zdegradované. Jednou z nich je aj chlórbenzén, ktorý sa používa vo farmaceutickom priemysle, pri výrobe pesticídov a farbív, v garbiarskom priemysle a iných [1]. Príspevok sa zaoberá oxidáciou chlórbenzénu pomocou železanu draselného ako zeleného oxidačného činidla a odstraňovaním chlórbenzénu pomocou aktívneho uhlia vo vodnom prostredí.

Pripravili sme zásobný roztok chlórbenzénu s koncentráciou 0,1 ml/l. Z tohto roztoku sme odoberali vzorky, do ktorých sa pridal tuhý železan draselný tak, aby bola koncentrácia železanového aniónu v roztoku (1, 3, 5 a 10) mg/l. Okrem týchto roztokov sme pripravili aj roztok s ekvimolárnym množstvom železanového aniónu. Pri experimentoch s aktívnym uhlím sme použili aktívne uhlie Carboraffin (špecifický povrch: 1074 m²/g; väčšina sú mezopóry). Koncentrácia pridaného práškového aktívneho uhlia vo vzorke roztoku bola (20, 60, 100, 200 a 300) mg/l. Všetky roztoky boli miešané a udržiavané pri laboratórnej teplote. Po uplynutí reakčnej doby boli roztoky analyzované pomocou vysoko účinnej kvapalinovej chromatografie.

V prípade železanu bola najvyššia dosiahnutá účinnosť odstránenia polutantu 41,3 % pri dávke 10 mg/l a pri použití aktívneho uhlia sa najviac podarilo odstrániť 58,7 % polutantu pri dávke aktívneho uhlia 300 mg/l.

Tento projekt bol podporený v rámci projektov OP VaV ITMS 26240120034, VEGA 1/0343/19, APVV-17-0183 a Grantu mladých výskumníkov v rámci Slovenskej technickej univerzity (ElCapFe).

- [1] Yuan Y.: *Ecotoxicological and Environmental Safety.* 193 (2020).

6Po11
APPLICATION OF PHOTOCHEMICALLY
ACTIVE COMPOUNDS AS INITIATORS
FOR PHOTO-ATRP

Mária Gurská¹, Anita Andicsová-Eckstein¹, and Jaroslav Mosnáček^{1,2}

¹*Polymer Institute SAS, Dúbravská cesta 9, 84541 Bratislava, Slovakia, maria.gurska@savba.sk*

²*CEMEA SAS, Dúbravská cesta 9, 84511 Bratislava, Slovakia*

In recent times, photoATRP belongs to the group of controlled polymerizations, which require a low concentration of radicals to form a polymer. Polymerization is mediated by light with a wavelength in the UV region or visible light region [1-3]. Here photoactive naphthalene-1,8-dicarboxylic acid mono- (NI) and diimide (NDI) derivatives were designed and used in the form of alkyl bromide initiators. They are supposed to have no or positive effect on the photoATRP process and also provide a more sensitive system for studying the initiation efficiency and viability of photoATRP through combination of GPC and fluorescence spectroscopy. In the case of light absorption used in photoATRP, the photoactive initiator increases the initiation efficiency due to the absorption of light and its conversion to energy in the initiation stage of polymerization. The synthesis of NI and NDI initiators consists of two steps. The first step is the conversion of naphthalene mono- resp. dianhydride to naphthalene mono- resp. diimide with free OH groups. Subsequently, in the second step, an ester bond was formed with the corresponding carboxylic acids or their derivatives. The prepared initiators were characterized and for the first time applied in photoATRP in the polymerization of methyl acrylate and butyl acrylate in various solvents in the presence of air. The living end of the polymer was also demonstrated using the prepared short oligomers as macroinitiators.

Acknowledgements: The authors thank grant agencies for financial support through projects APVV-19-0338, VEGA 2/0129/19. This work was performed during the implementation of the project Building-up Centre for advanced materials application of the Slovak Academy of Sciences, ITMS project code 313021T081 supported by the Integrated Infrastructure Operational Programme funded by the ERDF.

- [1] J. Mosnacek, A. Eckstein-Andicsova, K. Borska, *Polymer Chemistry* 6, 2523 (2015)
 [2] K. Borska, D. Moravcikova, J. Mosnacek, *Macromol. Rapid Commun.* 38, 1600639 (2017)
 [3] D. Bondarev, K. Borská, M. Šoral, D.

Moravčíková, J. Mosnáček, *Polymer* 161, 122 (2019)

6Po12
MULTI-STIMULI-RESPONSIVE
FERROCENE-BASED MICELLES FOR
SOLID TUMOR THERAPY BY EPR
EFFECT

S. Hoang^{1,2}, E. Gravel², M. Hruby¹, E. Doris²

¹*Institute of Macromolecular Chemistry, Czech Academy of Sciences, 2, Heyrovského nám. 1888, Břevnov, 162 00 Praha 6, Czech Republic, stephanehoang1@gmail.com*

²*CEA Paris-Saclay, Université Paris-Saclay, 91190 Gif-sur-Yvette, France*

Nanomedicine consists of designing nanosystems for diagnosis, monitoring and treating diseases such as cancer. These so-called nanosystems can have specific features such as active or passive targeting (EPR effect), encapsulation of active drugs, controlled delivery of the cargo, stealth properties and more. Herein, ferrocene-based micelles loaded with gold nanoparticles are used as drug carrier. Polyethyleneglycol as hydrophilic chain provides biocompatibility and stealth properties. Upon irradiation at the gold nanoparticles' surface plasmon resonance (SPR) frequency, hyperthermia is triggered, leading to the generation of reactive oxygen species (ROS) near the micelles as well as thermal ablation. Furthermore, Iron (II) is easily oxidizable especially in presence of ROS, also known as the Fenton reaction, to produce iron (III) which is a highly active Fenton catalyst. The presented nanosystem is based on the hyperthermia effect which has three major consequences: thermal ablation (apoptosis), generation of ROS leading to the oxidation of ferrocene and thus degradation of the micelles allowing a controlled delivery, and the immune restoration in the tumor environment. Therefore, we expect this nanoassembly to display a potent therapeutic effect and perhaps lead to new possibilities regarding the use of ferrocene as a multi-purpose linker.

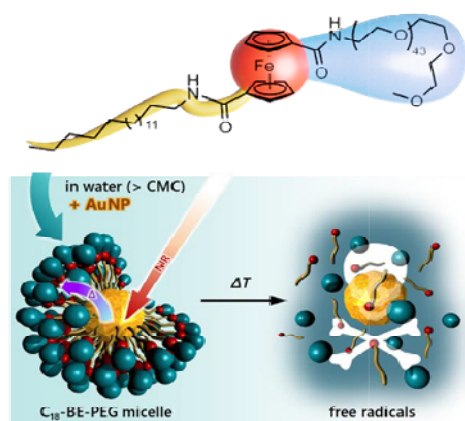


Fig. 1 Multi-stimuli-responsive ferrocene-based micelles.

The authors Thank to Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (grant # LTC19032).

6Po13 SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF SELF-HEALABLE, REPROCESSABLE AND RECYCLABLE BIO-BASED POLYESTER NETWORKS

Islam Ismael, Martin Danko

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

A chemically recyclable polyester was prepared according to our previous work [1]. A bio-monomer α -methylene- γ -butyrolactone (MBL) was copolymerized with ϵ -caprolactone (CL) [P(MBL-co-CL)] using Aluminum tris(isopropoxide) ($\text{Al}(\text{O}^i\text{Pr})_3$) as a coordination–insertion catalyst/initiator to prepare linear P(MBL-co-CL) or by using protic acid as a “metal-free” catalyst in combination with polyol as initiator in cationic ring-opening copolymerization to prepare multiarm P(MBL-co-CL).

The molar ratio of MBL to CL, different types of catalysts and polymerization temperature were studied to obtain P(MBL-co-CL) with different molar percent of MBL and desired molar masses. The possibility to obtain a self-healable, reprocessable and recyclable vitrimeric crosslinked P(MBL-co-CL) will be studied by crosslinking the copolymer by various types of compounds that contain dynamic covalent bonds such as disulfide bond or ester group-containing crosslinking agents.

The mechanical and rheological properties of the obtained P(MBL-co-CL) networks, T_g , stress relaxation time, self-healing ability, energy storage and loss, young’s modulus and tensile strength will be determined.

The authors thank the grant Agency VEGA for financial support through Grant VEGA 2/0168/21 and project APVV-19-0338. This work was also performed during the implementation of the project Building-up Centre for advanced materials application of the Slovak Academy of Sciences, ITMS project code 313021T081 supported by the Integrated Infrastructure Operational Programme funded by the ERDF.

[1] Danko M., Basko M., Ďurkáčová S., Duda A., J. Mosnáček, *Macromolecules*, 51, 3582–3596 (2018).

6Po14 THE POSSIBILITIES OF HYDRODEBROMINATION OF PESTICIDE BROMOXYNIL IN AQUEOUS SOLUTION BY COPPER-BASED MATERIALS

Barbora Kamenická¹, Tomáš Weidlich¹

¹University of Pardubice, Faculty of Chemical Technology, Institute of Environmental and Chemical Engineering, Chemical Technology Group, 532 10 Pardubice, Czech Republic,
barbora.kamenicka@student.upce.cz

Pesticides became an important component of worldwide agriculture systems during the last century, allowing for an increase in food production. However, it is well known that pesticides residues spread in the environment, causing contamination of ecosystems. The presence of pesticides in ecosystems is problematic, because some pesticides, especially halogenated ones, are persistent and may cause potential toxic effects on non-target organisms including humans [1]. Bromoxynil (BRX) is an herbicide that is used for the control of broad-leaves weeds. It is approved in almost all the European countries, listed as a highly hazardous chemical and classified as toxic for the reproduction. Residues of BRX were found in soil and surface water, even in groundwater. In water, it is likely to pose health hazards to non-target aquatic organisms [2]. Following toxicity of pesticides representation by Bromoxynil, studying its effective degradation to the readily biodegradable products is desired. Copper catalysed reductive treatment using hydrodebromination plays important role in detoxification of polybrominated aromatic contaminants such as BRX [2,3].

This contribution deals with modification of the reaction conditions necessary for the complete hydrodebromation of BRX by copper-based materials. This study also compares effect of copper, copper compounds and copper alloys on the hydrodebromation of Bromoxynil.

This work was supported by Student Grant Competition 2021 (SGS_2021_003).

- [1] Carvalho F. P.: *Food Energy Secur.* 6, 48 (2017).
 [2] Weidlich T., Kamenická B., Beneš L., Čičmancová V., Komersová A., Čermák J., Švec, P.: *Catalysts* 11, 699 (2021).
 [3] Weidlich T., Krejčová A., Prokeš L.: *Monatsh. Chem.* 144, 155 (2013).

6Po15 ADSORPCIA IÓNOV MEDI POMOCOU DÚŠKY MATERINEJ (*THYMUS SERPYLLUM* L.)

Mária Kováčová^{1,2}, Halyna Yankovych^{1,2}, Mariano Casas-Luna³, Michaela Remešová³, Lenka Findoráková¹, Martin Stahorský^{1,2}, Ladislav Čelko³, Matej Baláž¹

¹Ústav geotechniky Slovenskej akadémie vied, Watsonova 45, 040 01 Košice, kovacovam@saske.sk

²Fakulta materiálov, metalurgie a recyklácie, Technická univerzita v Košiciach, Letná 9, 042 01 Košice

³Vysoké učení technické v Brně, Stredoeurópsky technologický inštitút, Purkyňova 656/123, 612 00 Brno, Česká republika

V posledných rokoch sa rozšíril záujem v oblasti výskumu mechanizmov biosorpcie ako účinnej a lacnej metódy na odstránenie iónov ťažkých kovov z vodných roztokov [1]. Biosorpcia patrí medzi pasívne sanačné techniky a je založená predovšetkým na afinite medzi biosorbentom a adsorbátom [2].

Táto práca sa zameriava na stanovenie optimálnych parametrov pre adsorpciu medi (ako jedného z ťažkých kovov) na rastlinnom adsorbente, ktorým je dúška materina (*Thymus serpyllum* L.). Dúška materina už bola úspešne použitá na adsorpciu iónov antimónu Sb(III) [3].

Pri optimalizácii adsorpčných pokusov sa skúmal vplyv času kontaktu, pH a množstva adsorbenta. Zvyšková koncentrácia Cu(II) iónov vo filtrátoch po adsorpcii sa analyzovala atómovou absorpčnou spektrometriou. Najvyššia získaná adsorpčná kapacita pre ióny Cu(II) bola 12,66 mg g⁻¹ pri prirodzenom pH po 10 minútach adsorpcie a množstve adsorbenta 16 g l⁻¹. Vzorka po adsorpcii bola ďalej charakterizovaná röntgenovou difrakčnou analýzou, skenovacou elektrónovou mikroskopiou, termogravimetrickou

analýzou a bola podrobená aj meraniu zeta potenciálu.

Prezentované výsledky poukazujú na možnosť využitia dúšky materinej ako nového potenciálneho biosorbenta pre adsorpciu iónov medi.

Túto prácu podporila Slovenská agentúra pre výskum a vývoj na základe zmluvy č. APVV-18-0357 a Slovenská grantová agentúra VEGA (projekt 2/0044/18). Autor oceňuje aj podporu akcie COST CA18112: Mechanochemia pre obnoviteľný priemysel (www.mechsustind.eu).

- [1] Davis T. A., Volesky B., Mucci A.: *Water Res.* 37, 18 (2003).
 [2] Volesky B.: *Water Res.* 41, 18 (2007).
 [3] Littera P., Urik M., Ševc J., Kolenčík M., Gardošová K.: *Fresenius Environ. Bull.* 20, 11 (2011).

6Po16 STRUVIT - PREVÁDZKOVÝ PROBLÉM ČOV, ALE I DÔLEŽITÝ ZDROJ FOSFORU

Bibiána Kožárová¹, Zuzana Imreová¹, Klára Paganová¹

¹Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, b.kozarova@gmail.com

Najnovšou aktivitou pri výskume a aplikácii alternatívnych procesov odstraňovania fosforu na čistiarniach odpadových vôd je v súčasnosti aj jeho opätovné získavanie a využitie. Berúc do úvahy ďalšie využitie v poľnohospodárstve sa ako najvhodnejšie javí jeho kontrolované zrážanie do formy struvitu (MgNH₄PO₄·6 H₂O) a následná aplikácia ako hnojiva. Vo forme hnojiva predstavuje struvit pomaly rozpustnú zrazeninu, čo zabezpečuje pre rastliny kontinuálnejší prísun potrebných živín. Vedľa skvelých hnojivých vlastností, ktorými sa tento spomínaný minerál vyznačuje, existuje problém jeho samovoľného zrážania v kalových potrubíach ČOV. Táto kryštalická usadenina vytvára vodný kameň v odstredivkách a čerpadlách. V mnohých prípadoch prispieva tiež k upchatiu systémového potrubia i ďalšieho vybavenia, ako napr. anaeróbných digesterov, čo v konečnom dôsledku spôsobuje prevádzkové problémy a zvyšuje náklady na ČOV [1, 2, 3]. Predkladaný príspevok predstavuje výsledky laboratórných testov zameraných na schopnosť rozpúšťania struvitu procesom miešania v závislosti od niektorých faktorov, akými sú dĺžka miešania a hodnota pH, ako aj na jeho potenciálne využitie ako hnojiva. Posúdeniu vplyvu jednotlivých parametrov boli podrobené vzorky heterogénnej zrazeniny

struvitu pochádzajúce z dvoch reálnych čistiarní odpadových vôd, ktoré majú ako súčasť technológie anaeróbnou stabilizáciu kalu.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja, na základe zmluvy číslo APVV-17-0119.

- [1] Van Kauwenbergh S. J.: World Phosphate rock reserves and resources, International Fertilizer Development Center (2010).
- [2] de Baat Doelman J.: Removing Struvite from Wastewater Systems. In Modern Pumping Today (2018).
- [3] Drtil M., Hutňan M.: Technologický projekt. FCHPT STU Bratislava (2013). ISBN 978-80-89597-11-6.

6Po17 VOĽNOOBJEMOVÉ A ABSOPČNÉ VLASTNOSTI VODY V POLYMÉROCH NA BÁZE EPOXIDOVANÝCH RASTLINNÝCH OLEJOV SKÚMANÉ POZITRÓNOVOU ANIHLÁCIOU

David Pavel Kráľovič¹, Ondrej Šauša^{1,2}

¹Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra jadrovej chémie, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovenská republika; david.kralovic1996@gmail.com

²Slovenská akadémia vied, Fyzikálny ústav, Oddelenie jadrovej fyziky, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovenská republika; ondrej.sausa@savba.sk

Znalosti o voľnoobjemových a mikroštruktúrnych vlastnostiach polymérnych materiálov na báze rastlinných olejov sú dôležité z dôvodu ich vysokého potenciálu využitia v aplikačnej, ako i komerčnej sfére. Majú potenciál byť využité ako zadržiavacie matrice enzýmu lakáza na zlepšenie vlastností amperometrických biosenzorov [1]. Práca je zameraná na stanovenie voľných objemov vo fotopolymérnych matriciach na báze rastlinných olejov. Pozitrónová anihilačná spektroskopía (PALS) je spektroskopická metóda na mikroštruktúrnu analýzu polymérnych systémov. Test napučania poskytuje informácie o hustote zosieťovania polymérnej siete. Kombinácia týchto metód poskytuje informácie o vlastnostiach siete polymérnych matric. Na odhad veľkosti jednotlivých voľných objemov v týchto matriciach bol použitý semiempirický kvantovo mechanický model Tao-Eldrup. Bola stanovená úloha voľného objemu a hustoty sieťovania v polymérnych matriciach s potenciálnym využitím v priemysle a v biosenzorových technológiách.

Autori ďakujú agentúre APVV za podporu financovania výskumu uväznených systémov (grant č. APVV-16-0369). Vďaka patrí aj Dr. Tarasovi

Kavetskému, za odborné diskusie a poskytnutie vzoriek na analýzu.

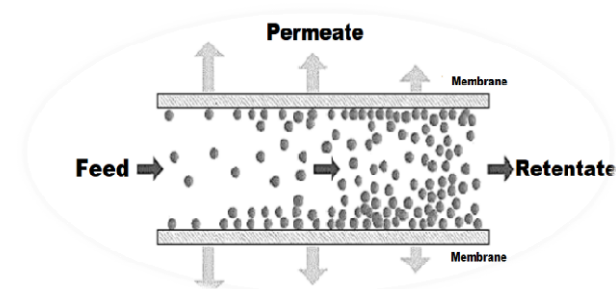
- [1] Kavetsky T. et al.: Eur. Polym. J. 115, p. 115 (2019)

6Po18 DYE REMOVAL FROM AQUEOUS SOLUTIONS BY NANOFILTRATION

Olga Krupková¹, Jiří Cuhorka¹, Libor Dušek¹

¹University of Pardubice, Faculty of Chemical Technology, Institute of Environmental and Chemical Engineering, Studentská 95, 532 10 Pardubice 2

Nanofiltration is a membrane separation process, where the driving force is the difference of pressure on both sides of the membrane. In membrane separation is input stream separated into permeate (the part of the mixture that passes through the membrane) and retentate (a portion of the mixture retained above the inlet surface of the membrane – concentrate) (pic. 1).



Pic. 1 Scheme of membrane separation

This process is used in the treatment of wastewater from galvanizing, textile and paper industries. Organic dyes, surfactants, heavy metal salts, toxic organic substances, etc. can be removed by nanofiltration. The model dye Acid blue 80 was selected for this work, which was removed from the aqueous solutions by nanofiltration.

It is a blue anthraquinone dye used for dyeing wool and polyamide [1]. During experiments attention was paid to the dependences of permeate flow intensity per time with different concentrations and the overall dependence of the permeate flow on the pressure, from where we could find the ideal pressure for operation, whether rejection is sufficient and whether this process can be affected by pH.

This work was supported by Student Grant Competition 2021(SGS_202_003).

- [1] Bianco Prevot, A., Brussino, M. C., Pramauro, E., Savarino, P., Augugliaro, V., Marci, G., Palmisano, L. Photocatalytic Degradation of Acid Blue 80 in Aqueous Solutions Containing TiO₂ Suspensions. *Environ. Sci. Technol.*, 35, 971-976, (2001).

6Po19

THE ROLE OF DYE'S STRUCTURE ON THE DEGRADATION RATE DURING INDIRECT ANODIC OXIDATION

Gabriela Kuchtová¹, Libor Dušek¹

¹Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice, ČR, gabriela.kuchtova@student.upce.cz, libor.dusek@upce.cz

The aim of this work was to evaluate the possibility of decolorization of effluents that contain structurally different azo and aminoanthraquinone dyes. These groups of dyes belong amongst the most frequently used in the textile and paper industry. The decolorization was performed by an indirect electrochemical oxidation in a single-chamber laboratory electrolyzer under galvanostatic mode. The anode used for the treatment was a planar boron doped diamond electrode. A suitable method for monitoring the effectiveness of decolorization of model wastewater was UV-VIS spectroscopy. The changes in decolorization rate of model solution were measured during indirect electrochemical oxidation in dependence on different initial pH in the presence of either sodium chloride or sodium sulphate, both frequently used during dying process. The time intervals corresponding to chromaticity change of electrolyzed solution were measured and kinetic constants were assessed. Results showed that the decolorization rate is higher in the presence of NaCl than Na₂SO₄ in the whole pH range and the structure of the dye has a direct impact on the velocity of the decolorization process.

This work was supported by Student Grant Competition 2021 (SGS_2021_003)

6Po20

OPTIMALIZÁCIA ŠTRUKTURÁLNEJ ANALÝZY APOLIPOPROTEÍNU CIII POMOCOU HMOTNOSTNEJ SPEKTROMETRIE

Filip Květoň¹, Zuzana Pakanová¹, Marek Nemčovič¹, Lucia Poliaková¹, Anna Šalingová², Peter Baráth¹

¹Chemický ústav SAV, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava,

²Centrum dedičných metabolických porúch NÚDCH, Limbová 1, 833 40 Bratislava
filip.kveton@savba.sk

Apolipoproteín CIII (Apo CIII) je súčasťou lipoproteínov bohatých na triglyceridy s veľmi nízkou hustotou a lipoproteínov s vysokou hustotou v plazme. Apo CIII bol počas posledných desaťročí identifikovaný ako nový biomarker zapojený do patogenézy rôznych ochorení, ako napríklad cukrovka [1], jeho koncentračné zmeny boli sledované pri akútnom zápale a kardiovaskulárnej ochrane [2]. Okrem toho sa Apo CIII používa ako marker pri biochemickom skríningu vrodených porúch glykozylácie [3] a to vďaka prítomnosti jedného O-glykozylačného miesta na treoníne-74.

Od roku 2012 sa realizoval jednoduchý postup prípravy vzorky s použitím malého množstva séra a následnej analýzy MALDI TOF. Proces sa javí ako spoľahlivý nástroj na analýzu štruktúry Apo CIII [4]. Táto metóda má však určité obmedzenia, ktoré prekonalala jej ďalšia optimalizácia. V našej štúdii boli sérové proteíny oxidované, aby sa zjednotili získané signály v hmotnostných spektrách MALDI TOF a umožnila sa tak presná relatívna kvantifikácia jednotlivých glykoizoforiem Apo CIII. Ako najvhodnejšia matrica pre analýzu Apo CIII v režime lineárneho pozitívneho iónového módu sa ukázala byť kombinácia 2,5-dihydroxyacetofenónu s hydrogencitranom diamónnym. 10-kanálový systém C8 SPE alebo 96-jamková platňa s imobilizovanou stacionárnou fázou C8 umožnili offline automatizáciu, čo zvýšilo robustnosť tohto prístupu.

POĎAKOVANIE

Táto práca bola podporená Ministerstvom zdravotníctva Slovenskej republiky v rámci projektu s registračným číslom 2019/7-CHÚSAV-4. Táto publikácia vznikla s podporou Operačného programu Integrovaná infraštruktúra pre projekt Štúdia štrukturálnych zmien komplexných glykokonjugátov v procese dedičných metabolických a civilizačných chorôb, ITMS: 313021Y920, spolufinancovaný z Európskeho fondu regionálneho rozvoja; bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja – projekt č. APVV-18-0336 a VEGA2/0060/21.

- [1] Aroner SA. et al.: *Am J Epidemiol* 186, 736-744 (2017)
 [2] Maeda N. et al.: *J Biol Chem* 269, 23610–23616 (1994)
 [3] Ondruskova N. et al.: *Metab Clin Exp* 82, 135-141 (2018)
 [4] Wada Y. et al.: *Glycobiol* 22(8), 1140-1144 (2012)

6Po21

**ROS-AKTIVOVATELNÁ PROLÉČIVA
 ZALOŽENÁ NA FERROCENYLIMINO-
 BORONÁTECHAŽÁŘENÍ PRO
 TESTOVÁNÍ ELEKTROCHEMICKY
 AKTIVOVATELNÝCH PROLÉČIV**

Karel Lacina¹, Jakub Věžník^{1,2}, Martin Konhefr¹,
 Zdenka Fohlerová³

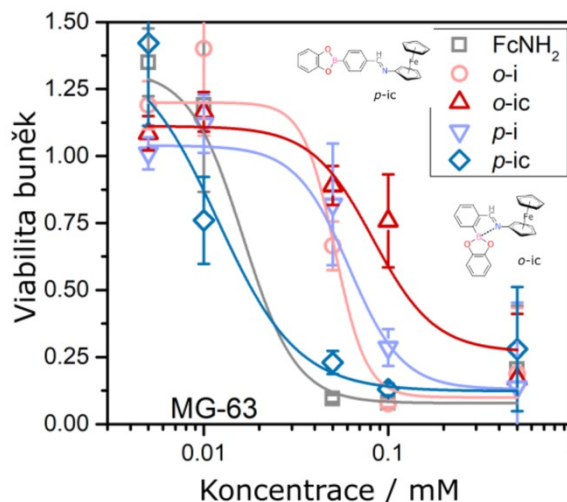
¹Středoevropský technologický institut (CEITEC MU),
 Masarykova Univerzita, Kamenice 5, Brno, 625 00,
 Česká republika

²Ústav chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova
 Univerzita, Kamenice 5, Brno, 625 00, Česká
 republika

³Středoevropský technologický institut (CEITEC VUT),
 Vysoké učení technické v Brně, Purkyňova 123, Brno,
 612 00, Česká republika

Deriváty ferrocenu lze použít jako redox-aktivní proléčiva (proléčivo – intaktní látka, která se aktivuje – stává léčivem – až po určité modifikaci, např. metabolizací či elektrochemickou aktivací). V rámci práce byly studovány čtyři deriváty ferrocenu (ferrocenkarboxylová kyselina, sulfocercenia, ferroceneboronová kyselina a aminoferrocen) a pozorovaná cytotoxicita byla vztažena k jejich redoxnímu potenciálu. Aminoferrocens nejnižším redoxním potenciálem vykazoval nejvyšší cytotoxicitu. Následně byly připraveny čtyři různé látky obsahující ve své struktuře aminoferrocen a fenylboronovou kyselinu a tyto byly testovány jakožto ROS-aktivovatelná proléčiva (ROS – Reactive Oxygen Species). Cytotoxicita těchto látek byla testována na rakovinné linii MG-63 (Obr. 1). Nejvyšší cytotoxicitu vykazoval ester katecholu *para*-ferrocenyliminoboronovou kyselinou *p-ic*. [1]

V následující práci bylo navrženo zařízení pro testování elektrochemicky aktivovatelných proléčiv. Zařízení bylo inspirováno diskovou difúzní metodou.



Obr. 1 Viabilita rakovinných buněk (linie MG-63) v přítomnosti aminoferrocenových derivátů. Derivát *p-ic* vykazoval nejvyšší cytotoxicitu (společně s aminoferrocenem, FcNH_2). Naproti tomu *ortho* derivát *o-ic* vykazoval nejnižší cytotoxicitu, a naopak byl naopak více cytotoxický pro zdravé buňky, jak bylo dokázáno v kontrolním experimentu (data nejsou ukázána).

Poděkování

Tato práce byla finančně podpořena Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy České republiky v rámci projektu CEITEC 2020 (LQ1601) a Českou grantovou agenturou, č. grantu 19-16273Y.

- [1] G.Jaouen, A. Vessières, S. Top, *Chemical Society Reviews* 44 (2015) 8802–8817
 [2] J. Věžník, M.Konhefr, Z.Fohlerová, K. Lacina, *Journal of Inorganic Biochemistry* (2021), *under revision*.

6Po22

**SORPCE TOXICKÝCH OXYANIONTŮ NA
 MODIFIKOVANÉ KAOLÍNY**

Miloslav Lhotka¹, Barbora Doušová²

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,
 Tel.: +420220445019, e-mail:

barbora.dousova@vscht.cz

Přírodní hliněné materiály jsou považovány za účinné a perspektivní sorbenty z ekonomických a ekologických důvodů. Obecně nejsou hlinitokřemičitany selektivními sorbenty pro aniontové kontaminanty díky nízkému pH (ZPC). Jejich jednoduchá povrchová předúprava Fe^{2+} může významně změnit povrchový náboj a tím silně zlepšit afinitu k aniontovým kontaminantům. Tato práce se zabývá sorpcí

toxických oxyaniontů arzenu, antimonu a selenu na modifikované kaolíny. Přírodní kaolin byl kalcinovan při 550° C za vzniku metakaolinu. Vzniklý metakaolin byl rehydroxylován 4, 7, 10 a 14 dnů při teplotě 175°C v autoklávu 0,6 mol/l roztokem FeCl₂. Koncentrace počátečních roztoků arzenu / antimonu / selenu byla 2,10⁻⁴ mol/l. Srovnání sorpčních kapacit ukázalo, že sorbent rehydroxylovaný po dobu 7 dnů dosáhl nejvyšší sorpční kapacity (0,03 - 0,16 mmol.g⁻¹), a tedy vykazuje nejlepší sorpční vlastnosti. Potvrdilo to i srovnání Langmuirových izoterm pro As⁵⁺ sorbovaný na sorbent s různými dobami rehydroxylace. Afinita oxyaniontů k sorbentům klesá v rozmezí Sb⁵⁺ > As⁵⁺ > Se⁴⁺ > Se⁶⁺ > As³⁺. Adsorpce As³⁺ nesledovala ani Langmuirův, ani Freundlichův adsorpční model. Z hlediska účinnosti adsorpce sorbenty ukázaly téměř 100% odstranění všech oxyaniontů kromě As³⁺, kde účinnost byla pouze 60%.

- [1] Doušová, B., Fuitová, L., Grygar, T., Machovič, V., Koloušek, D., Herzogová, L. & Lhotka, M. 2009. Modified alumino-silicates as low-cost sorbents of As(III) from anoxic groundwater. *J. Hazardous. Mater.* 165: 134-140.
- [2] Lhotka, M., Doušová, B., & Machovič, V. 2012. Preparation of modified sorbents from rehydrated clay minerals. *Clay Minerals* 47: 251-258
- [3] Rocha, J., Adams, J.M. & Klinowski J. 1990. The Rehydration of Metakaolinite to Kaolinite: Evidence from Solid-State NMR and Cognate techniques. *Journal of Solid State Chemistry* 89: 260-274

6Po23

SPRI: NOVÁ METODA PRO ZJIŠŤOVÁNÍ PERMEABILIT ROSTLINNÝCH MEMBRÁN

Dominika Marková^{1,2,3}

Vysoká škola báňská – Technická univerzita Ostrava, CEET, Institut environmentálních technologií, 17. listopadu 2172/15, 708 00 Ostrava-Poruba;¹Fakulta materiálově-technologická – VŠB – TUO;² e-mail: dominika.markova@vsb.cz;³

V zemědělství představují rostlinné membrány (kutikuly) často hlavní bariéru, kterou je třeba překonat při postřiku chemické látky na nadzemní části rostlin. Proto byla studována permeance vybraných rostlinných kutikul (*F. elastica* a *C. pyrifomis*) pro různá xenobiotika a analyty.

Pro vyhodnocení permeancí byla použita unikátně definovaná průtočná cela citlivého analytického přístroje SPRI (Surface Plasmon Resonance-imaging). Tato metoda umožňuje online detekci změn koncentrace vybraných xenobiotik či

různých analytů a umožňuje tak získat parametry pro rychlé a efektivní vyhodnocení permeancí jednotlivých rostlinných membrán. Modelové látky vybrané pro tento účel byly paracetamol, metazachlor a sacharóza. Experiment byl založen na měření difúze roztoku analytu skrze unikátně definovanou průtočnou celu s vloženou kutikulou. Dále byla měřena permeance kutikul pro vodu neošetřených a upravených kutikul *F. Elastica* pomocí chloroformu.

Cíle práce byly zaměřeny na přípravu kutikul, úpravu jejich povrchu chloroformem (extrakce vosku), vyhodnocení jejich povrchové morfologie pomocí SEM a samotné měření permeancí. Výsledky potvrzují použitelnost metody pro vyhodnocení propustnosti kutikul pro vodu a xenobiotika, a dále definují rozdíly mezi kutikulami s přítomností a bez přítomnosti vosků na jejich povrchu. Kombinace průtočné difúzní cely a kontinuálního měření koncentrace přes rostlinnou membránu transponovaných molekul pomocí SPR senzoru tak představuje nadějnou metodu pro stanovení permeabilit membrán pro xenobiotika vyskytující se v životním prostředí a také podhaluje funkce kutikuly jako transpirační bariéry.

Tato práce byla podpořena Doktorskou grantovou soutěží VŠB TU-Ostrava, s registračním číslem. CZ.02.2.69 / 0,0 / 0,0 / 19_073 / 0016945 v rámci operačního programu Výzkum, vývoj a vzdělávání v rámci projektu DGS / TEAM / 2020-004 „Study of photochemical, photocatalytic and membrane processes with application in environmental technologies“.

6Po24

CYTOTOXICITA UPKONVERZNÍCH NANOČÁSTIC

Petr Matouš¹, Dana Mareková², Lucia Machová², Magdalena Vosmanská³, Pavla Jendelová², Daniel Horák², Vít Herynek¹, Olexandr Shapoval⁴, Mykhailo Nahorniak⁴

¹ Centrum pokročilého preklinického zobrazování
1. LF UK

² Ústav experimentální medicíny AV ČR, v.v.i.

³ Vysoká škola chemicko-technologická v Praze

⁴ Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i.

Úvod: Upkonverzní nanočástice (UCNP) jsou speciální nanočástice skládající se z hexagonálního krystalu NaYF₄ dopovaného ionty lanthanoidů (aktivátor + senzibilizátor), např. Yb³⁺ nebo Er³⁺. Upkonverze je fluorescence s emisí kratší vlnové délky, než je excitace. Dvoufotonová excitace je obvykle dosahována zářením v blízké oblasti infračerveného záření

(NIR), jednofotonová emise pak probíhá ve viditelné oblasti spektra. Cílem práce je ověřit cytotoxicitu UCNP s různými biokompatibilními obaly na in vitro modelu nádorové linie 4T1 a proliferaci na liniích C6 a rMSC.

Metody: Viabilita buněčné linie 4T1 po 24h inkubaci s nanočásticemi PEG-NaYF₄ Yb³⁺ Er³⁺, c = 1-1000 µg/ml, byla stanovena pomocí MTT/SDS metody. Viabilita buněk C6 a rMSC v přítomnosti nanočástic bez obalu a s PEG, PMVEMA, PDMA obalem byla stanovena na automatickém counteru po obarvení AO/PI. Proliferace buněk v přítomnosti nanočástic byla určena na základě změny impedance pomocí přístroje XCelligence. Množství UCNP v buňkách bylo stanoveno pomocí ICP-MS.

Výsledky: Nejnižší cytotoxicitu vykazaly nanočástice PEG-NaYF₄ Yb³⁺ Er³⁺. Obalené částice pronikají do buněk podstatně snadněji než částice neobalené. Nádorové linie jsou k částicím citlivější než nenádorové. Použité metody stanovení viability poskytují srovnatelné výsledky.

Závěr: Obalené UCNP-PEG vykazují minimální toxicitu a představují slibnou cestu praktického využití jako kontrastních látek či nosičů léčiv v experimentální medicíně.

Podpora projektu: GAČR 21-04420S

Klíčová slova: UCNP, in vitro test, MTT, buněčná linie C6, rMSC, 4T1, proliferace, viabilita

6Po25

COMPARATIVE STUDY OF PRIMARY DRIERS IN OXIDATIVE DRYING PAINTS: MANGANESE(III) ACETYLACETONATE AND COBALT(II) 2-ETHYLHEXANOATE

Eliška Matušková¹, Jan Honzíček¹, Jaromír Vinklárek²

¹*Institute of Chemistry and Technology of Macromolecular Materials, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice*

²*Department of General and Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice*

Polyester resins modified with fatty acids belong to the highly used oxidative drying paints, commonly known as an alkyd resin. Film-formations is based on solvent evaporation and chemical processes proceeding on unsaturated fatty acid chains, also called autoxidation mechanism [1]. The protracted drying of alkyd resin is usually catalysed by primary driers.

Nowadays, there is a global demand for the replacement of cobalt(II)carboxylates, which are still the most widely used. This situation was stimulated by European REACH where was cobalt dries classified as a carcinogen 1B [2]. One of the possible alternative could be a manganese(III) acetylacetonate.

Catalytic activity of Mn(acac)₃ was studied in concentration range 0.1-0.01 wt. % on solvent-borne and high-solid alkyd binders. Prepared coatings were characterized by standardized mechanical tests. Kinetic parameters of autoxidation process, responsible for the chemical drying, has been measured by time-resolved infrared spectroscopy. Subsequently, the respective values were subtracted (half-time, induction period, maximum rate constant, time for maximum intensity of the deformation vibration band). All results were compared with cobalt(II) carboxylates.

Based on the results, catalytic activity of manganese(III) acetylacetonate seems to be the same or even better than cobalt(II) carboxylates

Ministry of Education, Youth and Sports (MEYS) of the Czech Republic is gratefully acknowledged for supporting this work (UPA SG311007).

[1] de Boer, J. W., Wesenhagen, P.V., Wenker, E.C.M., Maaijen, K., et al.: *Eur. J. Inorg. Chem.* 21 (2013).

[2] Simpson, N., Maaijen K., Roelofsen Y., Hage R.: *Catalysts.* 9, 825 (2019).

6Po26

MOLECULAR IMAGING BY NEWLY DEVELOPED TIMEPIX3 DETECTOR

Adam Modrý¹, Eliška Trojanová^{1,2}, Jan Jakubek², Viktor Sýkora¹, Jiří Dammer¹, Luděk Šefc¹

¹*Center for Advanced Preclinical Imaging (CAPI), First Faculty of Medicine, Charles University, Salmovská 3, Prague, Czech Republic, adamodry@lf1.cuni.cz*

²*ADVACAM s.r.o., U Pergamenky 12, Prague, Czech Republic*

A wide spectrum of organic, inorganic, biochemistry or polymer compounds are being used for diagnoses of a vast number of malfunctions such a cardiovascular, neuronc, metabolic or oncology diseases. Preclinical imaging is an important and irreplaceable method for research of new tracers, helps the understanding of biological processes and participates in translation of new therapeutic methods. This work focused on a new single photon emission computing tomography (SPECT)

prototype system (FullSPECT 3D) based on a semiconductor detector Timepix3. Widely used tracers like $\text{Na}^{99\text{m}}\text{TcO}_4$, $^{99\text{m}}\text{Tc}$ -HDP or ^{125}I -labeled antibody were used for the evaluation of standard analyzing methods like signal to background ratio (SBR) or spatial resolution by a line spread function. The results shows that this type of detector is suitable for small animal imaging. Thanks to the properties of these detectors, when every single event could be evaluated independently with an exact time and energy, the future development of machines based on these types of detectors could lead to an important quality image enhancement with reduction of scanning time and radiation dose.

This work was supported by Ministry of Industry and Trade of the Czech Republic (Project No. FV30413), by Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (Large RI Project LM2018129 Czech-BioImaging), by Charles University (Project No. SVV 260 519/2020), and by European Regional Development Fund (Project No. Z.02.1.01/0.0/0.0/16_013/0001775).

6Po27

WATER MATRIX LIMITATIONS FOR REMOVAL OF REACTIVE AZO DYE FROM DYEING WASTEWATERS USING THE PHOTOCATALYTIC PROCESS

Jiří Palarčík¹, Marek Smolný¹, Jiří Cakl¹

¹*Institute of Environmental and Chemical Engineering, University of Pardubice, Faculty of Chemical Technology, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Czech Republic*

Considering the great variety of fibers, dyes, process aids, and finishing products, the textile wet-processing industry generates wastewaters of great chemical complexity and diversity which are not adequately treated in conventional wastewater treatment plants [1, 2]. The objective of this study was to demonstrate the advantages/disadvantages of photocatalytic degradation of reactive azo dye Reactive Orange 12 in several complex matrices of simulated wastewater. A suspension photoreactor was equipped with TiO_2 catalyst and irradiated using a low energy UV-A LED source. The inorganic ions present in the treated systems affected dye adsorption, caused colloidal instability and acted as a hydroxyl radical scavenger. The wastewater decolorization was a significantly faster process in comparison with the decrease in total organic carbon content in the reaction mixture. This indicates that total mineralization is a gradual, longer-term process and that the original dye is

degraded through several degradation byproducts. The mineralization time was further significantly prolonged in the presence of organic nitrogen substances.

This work was supported by University of Pardubice, Project No. SGS-2021-003.

- [1] Holkar, C.R., Jadhav, A.J., Pinjari, D.V., Mahamuni, N.M., Pandit, A.B.: *J. Environ. Manag.*, 182 (2016)
- [2] Yaseen, D.A., Scholz, M.: *Int. J. Environ. Sci. Technol.* 16 (2018)

6Po28

BIOCOMPATIBILITY, BIODISTRIBUTION AND SOLUTION-DEPENDENT CLOUD POINT TEMPERATURE OF FOUR THERMORESPONSIVE POLYACRYLAMIDES

Ondřej Groborz^{1,2,3}, Kristýna Kolouchová¹, Jan Pankrác⁴, Peter Keša⁴, Tereza Krunclová¹, Aneta Pierzynová⁵, Jan Kadlec⁶, Mária Hovořáková⁵, Jaromír Šrámek⁵, Tomáš Kučera⁵, Pavel Švec^{1,2}, Martin Hrubý¹, Richard Hoogenboom⁷, Petr Štěpánek¹

¹*Institute of Macromolecular Chemistry, Czech Academy of Sciences, Heyrovského sq. 2, Prague 6, 162 06, Czech Republic*

²*Department of Organic Chemistry, Faculty of Science, Charles University, Hlavova 8, Prague 2, 128 00, Czech Republic*

³*Institute of Biophysics and Informatics, Charles University, First Faculty of Medicine, Salmovská 1, 120 00 Prague 2, Czech Republic, jan.pankrac@lf1.cuni.cz*

⁴*Center for Advanced Preclinical Imaging (CAPI), First Faculty of Medicine, Charles University, Salmovská 3, Prague 2, 120 00, Czech Republic*

⁵*Institute of Histology and Embryology, First Faculty of Medicine, Charles University, Albertov 4, Prague 2, 120 00, Czech Republic*

⁶*Weizmann Institute of Science, Department of Neurobiology, Rehovot 7610001, Israel*

⁷*Department of Organic and Macromolecular Chemistry, Ghent University, Krijgslaan 281-S4, 9000 Ghent, Belgium*

Thermoresponsive polymers (TPs) with lower critical solution temperature can precipitate when reach human body temperature. This makes them suitable as drug carriers forming depots after the injection. We compared precipitation temperature, cell toxicity and biocompatibility of four acrylamide-based homopolymers (poly[(N-2,2-difluoroethyl)acrylamide] (pDFEA), poly[(N-isopropyl)acrylamide] (pNIPAM), poly[(N,N-diethyl)acrylamide] (pDEA), and poly[(N-acryloyl)pyrrolidine] (pAP)). All tested TPs had lower precipitation temperature in fetal bovine

serum than in water or PBS. This shows that common characterization of TPs in non-physiological solution is insufficient for the evaluation of the medical potential. Low cell toxicity of tested TPs was confirmed by incubation with human fibroblasts. Six months after administration no histopathological changes were observed in muscle, kidneys, liver and spleen. All TPs covalently bonded to cyanine-7 formed depot after intramuscular injection into the thigh of CD1 mice. pDFEA and pNIPAM depots retained the fluorescent signal steady for the first 7 days and decreased to 50 % of the original value around 60th day. Fluorescent signal of pDEA and pAP depot was 50% already on 15th day. In all TPs except pNIPAM we observed increased fluorescent signal in liver and kidneys. We assume that tested TPs are promising candidates for future applications in medicine.

This work was supported by Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (Project No. LTC19032), Technology Agency of the Czech Republic (Project No. KAPPA TO01000074), Grant Agency of Charles University, GA UK (Project No. 379321) and Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (Large RI Project LM2018129 Czech-BioImaging).

6Po29 **VODOROZPUSTNÁ POLYMERNÍ** **KANCEROSTATIKA S ENZYMOVĚ** **ŠTĚPITELNÝMI VAZBAMI:** **PROTINÁDOROVÁ ÚČINNOST IN VIVO**

Michal Pechar¹, Robert Pola¹, Lenka Horáková¹, Aneta Dydowiczová¹, Marcela Filipová¹, Jun Fang², Tomáš Etrych¹, Richard Laga¹

¹Ústav makromolekulární chemie, AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 2, Praha 6, pechar@imc.cas.cz
²Faculty of Pharmaceutical Science, Sojo University, Ikeda 4-22-1, Nishi-ku, Kumamoto 860-0082, Japan

Navázáním nízkomolekulárního cytostatika na hydrofilní polymerní nosič lze dosáhnout výrazného zlepšení farmakokinetiky léčiva, snížit jeho nespecifickou toxicitu a zajistit jeho zvýšenou akumulaci v nádorové tkáni díky tzv. EPR (z angl. enhanced permeability and retention) efektu.

V této práci byly připraveny a charakterizovány polymerní konjugáty protinádorových léčiv doxorubicinu a pirarubicinu se dvěma enzymově štěpitelnými peptidovými spojkami, Gly-Phe-Leu-Gly a Val-Cit-4-aminobenzyl alkohol (Val-Cit-Aba), mezi léčivem a polymerním nosičem na bázi kopolymerů *N*-(2-hydroxypropyl)-methakrylamidu. Jako kontrola byl použit

analogický polymerní konjugát s enzymově nedegradovatelnou spojkou β -Ala. Při enzymové hydrolyze spojky Val-Cit-Aba, používané v některých klinicky schválených konjugátech protilátek s kancerostatiky, dojde nejprve k rozštěpení vazby mezi Cit a Aba za vzniku derivátu léčiva s navázaným Aba. Následuje rychlá 1,6-eliminace Aba za vzniku nemodifikovaného léčiva a oxidu uhličitého. Hlavní výhodou použití této spojky je výrazně vyšší rychlost uvolňování léčiv ve srovnání s konjugáty se spojkami, které po enzymolýze nepodléhají zmíněné 1,6-eliminaci. V důsledku toho lze očekávat i celkově zvýšenou terapeutickou účinnost příslušných polymerních léčiv.

U připravených polymerních konjugátů byla změřena rychlost uvolňování léčiv pomocí lysosomální proteasy kathepsinu B, byla stanovena jejich cytotoxicita a intracelulární distribuce v nádorových buňkách *in vitro* a změřena jejich protinádorová aktivita na myších *in vivo*.

Práce vznikla za podpory Grantové Agentury České Republiky, grant č. 19-08176S.

[1] Ulbrich K et al.: Chem. Rev. 116, 5338 (2016).

6Po30 **PREDIKCE BIOLOGICKÉ DOSTUPNOSTI** **RTUTI VE VODNÍCH EKOSYSTÉMECH** **POMOCÍ TECHNIKY DIFÚZNÍHO** **GRADIENTU V TENKÉM FILMU**

Pavčina Pelcová¹, Andrea Ridošková¹, Radovan Kopp², Jan Grmela², Ondřej Malý², Helena Absolínová¹, Marie Hružová¹

¹Mendelova univerzita v Brně, Ústav chemie a biochemie, Zemědělská 1, 613 00 Brno, Česká republika, pavlina.pelcova@mendelu.cz

²Mendelova univerzita v Brně, Ústav zoologie, rybářství, hydrobiologie a včelařství, Zemědělská 1, 613 00 Brno

Stanovení celkového obsahu rtuti ve vodě, nebo sedimentu není dostatečným ukazatelem biologické dostupnosti rtuti ve vodním ekosystému, protože biologická dostupnost rtuti je významně ovlivněna řadou exogenních i endogenních faktorů. Mezi tyto faktory patří především fyzikálně-chemické vlastnosti vody a sedimentů, koncentrace a speciace rtuti, interakce rtuti s ligandy, druh vodního organismu, cesta vstupu rtuti do vodního organismu i jeho vývojové stádium a zdravotní stav [1].

Protože princip absorpce kovů technikou difúzního gradientu v tenkém filmu je velmi

podobný absorpci kovů biologickými buňkami živého organismu, byla DGT technika testována pro účely predikce biologické dostupnosti rtuti pro vodní organismy (*Cyprinus carpio L.*, *Elodea canadensis*, *Myriophyllum spicatum*, *Ceratophyllum demersum*). DGT jednotky byly tvořeny polyethersulfonovým filtrem, agarosovým difúzním gelem, a polyakrylamidovým sorpčním gelem s obsahem pryskyřice Ambersep GT 74. Obsah rtuti byl stanoven metodou AAS [2].

Byla pozorována statisticky významná pozitivní Pearsonova korelace mezi hmotnostním tokem rtuti do jednotek DGT a koncentrací rtuti v listech submerzních vodních rostlin ($r > 0,96$), a ve vstupních orgánech (žábry, kůže, šupiny a oči) kapra obecného ($r > 0,73$) a to i v přítomnosti chloridů a huminových kyselin, které patří mezi hlavní ligandy snižující biologickou dostupnost rtuti.

Technika DGT byla schopna předpovědět biologickou dostupnost Hg^{2+} pro vstupní orgány vodních organismů.



Výzkum a účast na konferenci byly finančně podpořeny projektem Grantové agentury ČR (19-11528S) a projektem PROFISH CZ.02.1.01 / 0.0 / 0.0 / 16_019 / 0000869.

- [1] Erickson R.J., Nichols J.W., Sook P.M., Ankley G.T.: *Bioavailability of chemicals contaminants in aquatic systems*, in *The Toxicology of Fishes*, R.T. DiGiulio and D.E. Hinton, Editors. 2008, CRC Press: London. 9-54 (2008).
- [2] Pelcová P., Dočekalová H., Kleckerová A.: *Anal. Chim. Acta*, 819, 42 (2014).

6Po31 HODNOCENÍ TOXICKÉHO VLIVU BROWNFIELDS V MORAVSKOSLEZSKÉM KRAJI NA ŽIVOTNÍ PROSTŘEDÍ

Hana Kolářová¹, Hana Sezimová¹, Martin Mucha²,
Ivan Urban³

¹Ostravská univerzita, katedra biologie a ekologie,
Chittussiho 10, 710 00 Ostrava, hana.sezimova@osu.cz

²Ostravská univerzita, katedra chemie, 30. dubna 22,
702 00 Ostrava, martin.mucha@osu.cz

³Slezská univerzita v Opavě, Bezručovo náměstí 1150,
746 01 Opava, iurban@centrum.cz

Cílem studie bylo zhodnotit míru rizikosti kontaminace vybraných brownfieldů nacházejících se na území Moravskoslezského kraje na životní prostředí. Prezentované výsledky vycházejí ze zhodnocení vzorků půdy odebraných na šestnácti vybraných profilech vyskytujících se na území čtyř brownfieldů pomocí baterie ekotoxikologických testů zahrnujících indikátorové organismy různých trofických úrovní. Ekotoxikologické hodnocení bylo provedeno kontaktními testy a rovněž na vodných výlužích půdních vzorků pomocí akvatických testů. Sledování byla doplněna kvantitativní analýzou majoritních a těžkých kovů ze stabilizovaných vodných výluhů vzorků půdy. K detekci akutní toxicity byl využit kontaktní test inhibice růstu kořene *Lactuca sativa*, test inhibice reprodukce a mortality *Folsomia candida*, dále test klíčivosti a inhibice růstu na semenech *Sinapis alba* a luminiscenční test na baktériích *Vibrio fischeri*, které byly využity k hodnocení vodných výluhů. Z výsledků testů je zřejmé, že všechny analyzované vzorky z vybraných brownfieldových lokalit jsou v určité míře toxické pro indikátorové organismy. Rovněž bylo potvrzeno, že vypovídající hodnota akvatických ekotoxikologických testů je nižší a pro testování toxických látek vyskytujících se v půdě je vhodné preferovat kontaktní ekotoxikologické testy.

6Po32**SEPARATION AND DETERMINATION OF ²²⁶RA USING MODIFIED SORBENT FORM FLY ASH**

Veronika Silliková¹, Silvia Dulanská^{2,3}, Miroslav Boča¹, Zuzana Netriová¹, Blanka Kubíková¹

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

²*Institute of Medical Physics, Biophysics, Informatics and Telemedicine, Faculty of Medicine, Comenius University, Sasinkova 2, 813 72 Bratislava, Slovakia*

³*Slovak Medical University, Bratislava, Limbová, 12 833 03 Bratislava, Slovakia*

From the point of view of electricity production, fly ash is a waste material, while from the point of view of coal utilization it is a source that is just beginning to be fully utilized [1,2]. Fly ash from the company OFZ a.s. Istebné was selected to test the possibility of ²²⁶Ra separation. As a first step fly ash was chemically modified with 0.5 mol·dm⁻³ KMnO₄ solution. When testing the effect of monovalent ions (Na⁺, K⁺), no effect was found on the sorption of ²²⁶Ra. For divalent cations (Ca²⁺, Mg²⁺) the percent sorption was above 90% up to an ion concentration of 50 mol·dm⁻³. The sorption of radium on the modified sorbent at a pH values (5 – 9) was higher than 90%. Applying the findings to real mineral water samples, it was found that the modified sorbent can be used to determine ²²⁶Ra activity in mineral water samples. The measured values of volume activities did not exceed the limits set by the Ministry of Health of Slovakia. The developed method is advantageous because the time required for separation as well as the volume of used chemicals and the waste generated after separation are minimised [3].

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-19-0270. The work was part of the dissertation entitled Silicates, the basis of technological processes for the separation and immobilization of radionuclides, which was written and defended at the Department of Nuclear Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University in Bratislava.

- [1] Iyer R.S., Scott A.J.: *Resources, Conversation and Recycling*, 31: 217 – 228 (2001).
- [2] Kikuchi R.: *Resources, Conversation and Recycling*, 27: 336 – 346 (1999).
- [3] Silliková V.: Silikáty, základ technologických procesov pre separáciu a imobilizáciu rádionuklidov. *Dissertation theses*, (2020).

6Po33**UHLÍKOVÉ KVANTOVÉ BODKY PRIPRAVENÉ Z KYSELINY CITRÓNOVEJ A ICH POTENCIÁLNE VYUŽITIE V PRAXI**

Lucia Lowenbergová¹, Eva Boldišová¹, Eva Špitalská¹

¹*Virologický ústav, Biomedicínske centrum, SAV, Dúbravská cesta 9, 845 05 Bratislava, eva.spitalska@savba.sk*

Rickettsiózy sú ochorenia vyvolané baktériami rodu *Rickettsia*, u ľudí spôsobujú mierne až ťažké príznaky, ktoré sa môžu končiť aj smrťou. Liečba rickettsiálnych infekcií u ľudí sa vykonáva za pomoci podania antibiotík hlavne skupiny tetracyklínov. Novodobý fenomén rezistencie a perzistencie mikroorganizmov voči antibiotikám neustále sťažuje úspešné vyliečenie pacienta. Štúdia analyzuje efekt fotodynamickej inaktivácie (PDI) *in vitro*, s potenciálnym využitím v prípade včasnej rickettsiálnej infekcie vyskytujúcej sa ešte v koži spôsobenej bakteriálnym patogénom *Rickettsia slovaca* kmeň 13-B, ktorý sa na území Slovenskej republiky vyskytuje od roku 1968. PDI bola realizovaná použitím uhlíkových kvantových bodiek pripravených z kyseliny citrónovej (CA-CQD). Účinok PDI na infekciu 2,41x10⁵ počet kópií *R. slovaca*/μl použitím svetla vlnovej dĺžky 470 nm a 3,2 mg/ml CA-CQD nebol štatisticky významný, avšak použitím 0,08 mg/ml CA-CQD bol antirickettsiálny účinok štatisticky významný už po 24 h p.i., po 48 h p.i antibakteriálna aktivita dosiahla hodnotu 95,24 %. Úspešnosť *in vitro* pokusov použitia PDI na inhibíciu, resp. úplnú elimináciu rickettsiálnej infekcie Vero buniek poskytuje nádej alternatívnej liečby rickettsiálnej infekcie človeka vyskytujúcej sa ešte v koži krátko po pricicaní kliešťa, a tým následného zníženia užívania antibiotík pri rozsiahlejšej infekcii.

Štúdia bola finančne podporená projektom VEGA 2/0021/21, APVV-19-0066, APVV-19-0519. Za prípravu CA-CQD ďakujeme pracovníkom skupiny Dr. Špitalského, Oddelenie kompozitných materiálov, Ústav polymérov SAV.

6Po34
**SECONDARY METABOLITES,
 SCREENING OF PHYTOCHEMICALS IN
 FAGUS, QUERCUS AND BETULA SPECIES
 AND THEIR ANTIVIRAL PROPERTIES**

Igor Šurina, Martina Bednárová, Michal Jablonský,
 Radko Tiňo, Aleš Ház

Corresponding author: Ing. Igor Šurina, PhD.,
 Igor.Surina@stuba.sk

*Institute of Natural and Synthetic Polymers,
 Department of Wood, Pulp and Paper,
 Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak
 University of Technology in Bratislava,
 Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia*

Abstract

The aim of this publication is to summarise available information concerning the extraction and identification of compounds present in the bark of deciduous trees *Fagus species*, *Quercus species* and *Betula species*. Subsequently, the objective was to evaluate the potential bioactive properties of the identified compounds with the focus on their possible use in the fight against the SARS-CoV-2 virus causing the current pandemic. The outcome of this publication is a table of selected extractive compounds whose bioactive properties have been reported in previous studies. In this publication it has been found that in the bark of deciduous trees there are at least 16 antiviral compounds (procyanidin C1, (+)-catechin, (-)-epicatechin, gallic acid, taxifolin, pentagalloyl glucose, ferullic acid, vanilic acid, p-coumaric acid, ursolic acid, betulin, betulinic acid, betulinic aldehyde, oleanolic acid, lupenone, betulonic acid). According to the results of this publication it can be stated that tree bark extraction is a suitable way for the by-product valorisation of wood processing.

Key words: tree bark; extractives; isolation; identification; properties; applications

Acknowledgment

This publication was supported by the Slovak Scientific Grant Agency contract: VEGA 1/0403/19

and by the grant APVV-14-0393, financed by the Slovak Research and Development Agency

References

- [1] Jablonský Michal, Nosařová Jaroslava, Sládková Alexandra, Ház Aleš, Kreps František, Váľka Jozef, Miertuš Stanislav, Frečer Vladimír, Ondrejovič Miroslav, Šima Jozef, Šurina Igor: Valorisation of softwood bark through extraction

of utilizable chemicals. A review. In Biotechnology advances. Vol. 35, Iss. 6 (2017), p. 726-750. ISSN 0734-9750. DOI: 10.1016/j.biotechadv.2017.07.007.

- [2] Zuzana Burčová, František Kreps, Mária Greifová, Michal Jablonský, Aleš Ház, Štefan Schmidt, Igor Šurina: Antibacterial and antifungal activity of phytosterols and methyl dehydroabietate of Norway spruce bark extracts, Journal of Biotechnology 282, 18-24, 2018, DOI: 10.1016/j.jbiotec.2018.06.340.
- [3] Zuzana Burčová, František Kreps, Petra Strižincová, Aleš Ház, Michal Jablonský, Igor Šurina, Štefan Schmidt: Spruce Bark as a Source of Antioxidant Active Substances, BioResources 14 (3), 5980-5987, 2019, DOI: 10.15376/biores.14.3.5980-5987.

6Po35
**INHIBÍCIA AKTIVITY ČISTIARENSKÉHO
 KALU ANTIBIOTIKAMI**

Dóra Varjúová¹, Petra Szabová¹, Igor Bodík¹

¹*Oddelenie environmentálneho inžinierstva, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, dora.varjuova@stuba.sk*

Hlavnou témou tejto štúdie bolo zistiť vplyv vybraných antibiotík na respirometrickú aktivitu mikroorganizmov čistiarenskeho kalu. V rámci praktickej časti práce bolo vykonaných niekoľko respirometrických meraní s aktivovaným kalom z prostredia čistiarenske odpadových vôd, pričom bol sledovaný vplyv troch vybraných liečiv (konkrétne antibiotík) – sulfametoxazol (SMX), sulfapyridín (SP) a ciprofloxacín (CPX) – na aktivitu kalu. Výsledkom práce je poukázanie na inhibičný účinok všetkých sledovaných antibiotík a uvedenie percentuálnej miery sledovanej inhibície. Pri sledovanej látke SMX dosahovala stanovená inhibícia hodnoty z intervalu 9,67 až 27,7 %, v závislosti od koncentrácie sledovanej látky a druhu respirometrických meraní. Pre antibiotikum SP boli namerané hodnoty inhibície v intervale od 1,13 % až po 31,9 %. Antibiotikum CPX inhibovalo aktivitu mikroorganizmov v aktivovanom kale v percentuálnom rozmedzí od 4,55 % do 28,8 %.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja, na základe zmluvy číslo APVV-17-0119.

POSTERY - SEKCIA 7
CHEMPROGRESS – CHEMICKÉ
TECHNOLÓGIE

7Po01

**VPLYV ŽELEZANOV A ZEOLITOV PRI
ODSTRAŇOVANÍ KARBAMAZEPÍNU
A KOFEÍNU Z ROZTOKOV**

*Michaela Benköová, Ján Híveš, Emília Mališová,
Andrea Červenková*

*Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU
v Bratislave, Oddelenie anorganickej technológie,
Radlinského 9, 812 37 Bratislava,
michaela.benkoova@stuba.sk*

V súčasnosti je veľmi aktuálna problematika kontaminácie vôd rôznymi polutantmi. Povrchové vody sú znečisťované napríklad liečivami, produktmi dennej hygieny, čistiacimi prostriedkami, pesticídami a mnohými ďalšími látkami. Pri dočisťovaní takýchto odpadových vôd sa ako perspektívna možnosť javí použitie železanov[1,2].

Účinnosť degradácie železanmi bola overovaná HPLC analýzou. Boli použité dva typy železanov s rôznou čistotou, ktorá bola stanovená metódou UV-VIS spektrofotometrie. Po pridaní rovnakého množstva železanov do roztokov karbamazepínu a kofeínu boli pozorované aj farebné rozdiely. Aj napriek rovnakému množstvu použitého železanu bola dokázaná rozdielnosť degradačných účinkov. Do roztokov karbamazepínu a kofeínu boli pridané aj samotné zeolity jemnejšej a hrubšej frakcie.

Výsledky ukázali, že pri použití oboch typov zeolitu bola účinnosť odstraňovania karbamazepínu vyššia ako účinnosť odstraňovania kofeínu. Pri aplikácii železanov do roztokov vzrástla účinnosť pri karbamazepíne skoro dvojnásobne pri porovnaní so železanom menšej čistoty. V prípade kofeínu to bolo viac ako päťnásobne. To znamená, že na účinnosť odstraňovania má vplyv nielen koncentrácia, ale aj čistota použitého železanu, ktorá závisí od spôsobu prípravy.

Táto práca vznikla vďaka podpore Ministerstva Školstva, Vedy, Výskumu a Športu SR v rámci projektu VEGA 1/0343/19, Agentúrou pre podporu výskumu a vývoja APVV-17-0183 a vďaka Grantovej schéme na podporu excelentných tímov mladých výskumníkov v podmienkach STU v Bratislave (EiCapFe).

- [1] Lee Y., Cho M., Kim J.Y., Yoon J. : *J. Ind. Eng. Chem.* 10, 161-171 (2004).
[2] Kubiňáková E., Gál M., Kerekeš K., Híveš J.: *Chemické listy.* 109, 714-717 (2015).

7Po02

**MOŽNOSTI ZVYŠOVANIA STABILITY
ELEKTROCHEMICKY
PRIPRAVOVANÝCH ŽELEZANOV
POMOCOU KAPSULÁCIE SO ZEOLITMI**

*Andrea Červenková¹, Ján Híveš¹, Emília Mališová¹,
Michaela Benköová¹*

*¹Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU
v Bratislave, Oddelenie anorganickej technológie,
Radlinského 9, 812 37 Bratislava,
andrea.cervenkova@stuba.sk*

Vo vodách po celom svete v súčasnosti neustále narastá množstvo rôznych polutantov. Použitie tradičných činidiel pri úprave vôd je spojené s možnou tvorbou toxických vedľajších produktov. Železany účinne rozkladajú mnohé kontaminanty a súčasne sa pritom redukujú na netoxický hydratovaný oxid železitý, vďaka čomu sú označované za „zelené oxidanty“. Ich vysoká reaktivita je však spojená s nízkou stabilitou, čo znemožňuje ich dlhodobé skladovanie a znižuje ich čistotu. Ako sľubná metóda pre zvyšovanie stability železanov sa javí ich kapsulácia pomocou zeolitov, ktoré predstavujú vynikajúci sorpčný prírodný materiál [1,2].

Na dlhodobé sledovanie stability železanov boli pripravené dve série tabletiék s rôznym pomerom zeolit/železan 97:3 a 95:5. Pripravené boli z komerčne zakúpeného zeolitu a elektrochemicky pripraveného železanu draselného čistoty 28,03 %, ktorá bola stanovená spektrofotometricky. Časť tabletiék bola skladovaná voľne na vzduchu a časť bez prístupu vzduchu v exsikátore. Pomocou UV-VIS analýzy bol posudzovaný pokles čistoty železanu v tabletkách i samotného nezakapsulovaného železanu.

Výsledky ukázali, že po 12 týždňoch klesla čistota zatabletovaného železanu v exsikátore o (20-30) % a na vzduchu o (30-40) %. Degradácia čistoty samotného nezakapsulovaného železanu predstavovala 70 %, resp. 80 %, v závislosti od prostredia. Kapsulácia železanov so zeolitmi teda predstavuje vhodný spôsob zvýšenia ich stability s časom.

Táto práca vznikla vďaka podpore Ministerstva Školstva, Vedy, Výskumu a Športu SR v rámci projektu VEGA 1/0343/19, Agentúrou pre podporu výskumu a vývoja APVV-17-0183 a vďaka Grantovej schéme na

podporu excelentných tímov mladých výskumníkov v podmienkach STU v Bratislave (ElCapFe).

- [1] Lee Y., Cho M., Kim J. Y., Yoon J.: *J. Ind. Eng. Chem.* 10, 161-171 (2004).
 [2] Kubiňáková E., Gál M., Kerekeš K., Híveš J.: *Chem. Listy* 109, 714-717 (2015).

7Po3

CHARACTERIZATION OF HYDROTALCITES SUITABLE FOR DEACIDIFICATION OF CELLULOSIC MATERIALS

Jana Jurišová, Vladimír Danielik, Marta Ambrová, Milan Králik, Katarína Vizárová

Faculty of Chemical and Food Technology STU in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia, jana.juriso@stuba.sk

The hydrotalcites (HT) are compounds with a layered structure having the general formula $[M^{2+}_{(1-x)}M^{3+}_x(OH)_2](A^{n-}_{x/n}) \cdot mH_2O$. The basic representative is a natural mineral of the composition $Mg_6Al_2(OH)_{16}CO_3 \cdot 4H_2O$. HT for an industrial use are prepared synthetically by precise protocols, what results in reproducible well defined, predetermined chemical composition, particle size distribution as well as other desired properties. The most common preparation procedures are based on the reaction of magnesium and aluminium salts dissolved in water (e.g. chlorides, nitrates, sulphates) with an aqueous solution of sodium hydroxide and carbonate [1].

Despite the widespread using of hydrotalcites as deacidifying agents in the field of polymer stabilization and in acid-suppressing drugs, applications for the deacidification of cellulosic materials are not mentioned in the available literature [2]. Due to the layered structure, HT might penetrate more easily into the volume of the porous cellulosic material, especially in the case of nanoparticles, compared to the standard MgO particles used for mass deacidification. To use HT in paper deacidification, submicro particles (below 1 μm) are required and special deacidification systems have to be applied (selection of suitable liquid carriers).

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under contract no. APVV-18-0155 (Synthesis, compatibilization and transport of components of multifunctional systems suitable for the stabilization of cellulosic materials - MUFUSCEM).

- [1] Cavani F., Trifiro F., Vaccari A.: *Catalysis Today*, 11, 173-301(1991).
 [2] Hubbe, M.A., Smith, R.D., Zou, X., Katuscak, S.,

Potthast, A., Ahn, K.: *BioRes.* 12(2), 4410-4477 (2017).

7Po04

MODIFICATION OF SELECTED SPECIES OF WOOD BY ATMOSPHERIC PLASMA

Peter Jurkovič¹, Igor Novák², Ján Matyašovský¹, Peter Duchovič¹, Angela Kleinová², Matej Mičušík²

¹VIPO, a.s., 95801 Partizánske, Slovakia

jmatyasovsky@vipo.sk

²Polymer Institute of the Slovak Academy of Sciences, Slovakia, 845 41 Bratislava, Slovakia

The low-temperature plasma discharge modification of wood increases hydrophilicity and adhesive properties of wood [1]. The atmospheric discharge plasma (ADP) modification in air was suggested as an appropriate method for the polarity increasing of the wood surface [2]. The use of ADP is currently an efficient method for wood surface treatment. This modification method is considered as an ecologically friendly method. The surface properties of various wood species (beech, maple, birch) were pre-treated by ADP. The increase of polar component of surface energy of plasma-modified wood was observed. The water contact angle on the investigated wood surfaces diminished with increase of modification time. During aging the water contact angle of the plasma-treated wood surfaces increased rapidly for two days, after which the aging process was slower. The FTIR spectrum of plasma-treated wood is represented by mixed spectrum (composition) of cellulose and lignin with characteristic peaks corresponding to O–H bonds (with a maximum at about 3400 cm^{-1}) and fingerprints assigned to the – CO, – COO and – CH₂ – bonds typical for polysaccharides. The peak in the FTIR spectrum at 898 cm^{-1} corresponding to glycosidic linkages appears as a typical spectral band of wood.

Acknowledgements: The authors are grateful for financial support to the Slovak Research and Development Agency projects No. APVV-16-0177, APVV-17-0456, APVV-18-0378 and APVV-19-0269. APVV-20-159

- [1] Hünnekens B., Avramidis G., Ohms G., Krause A., Viöl W.: *Applied Surface Science* 441, 564 (2018).
 [2] Novák I., et al: *BioResources* 11, 6335 (2016).

7Po05**μ-RAMANOVA SPEKTROSKOPIA NA CHARAKTERIZÁCIU KORÓZNYCH VRSTIEV ŽELEZNÝCH PREDMETOV**Roman Košťúr, Matilda Zemanová¹

¹STU v Bratislave Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava; roman.kostur@stuba.sk

Predmetom štúdia korózie železných predmetov a uhlíkových ocelí je snaha o stabilizáciu vrstiev korózných produktov, čomu predchádza analýza a identifikácia týchto vrstiev. μ-Ramanova spektroskopia je prostriedkom na stanovenie fázovej štruktúry korózných vrstiev, ktoré vznikli pôsobením korózneho prostredia na železný predmet/artefakt [1]. Cieľom práce bolo porovnať vývoj korózných vrstiev v čase po expozícii v atmosférach s rôznymi stupňami korózne agresivity podľa normy STN EN ISO 9223. Porovnávali sa korózne vrstvy na báze železa pre železný artefakt z Bratislavského hradu (cca 300 rokov) a dlhodobo exponované upravované vzorky (15 rokov) voči štandardu, ktorým bola skorodovaná oceľ v priemyselnej atmosfére. Identifikovali sa korózne produkty, ktoré jednoznačne dokazujú vývoj korózných vrstiev v čase. Pre štandard a dlhodobo exponované upravené vzorky sa priradili fázy lepidokrokít (γ – FeO(OH)) a akaganeit (β – FeO(OH)), pre artefakt sa identifikoval magnetit (Fe₃O₄), goethit (α – FeO(OH)) a lepidokrokít. Dlhodobým účinkom atmosféry dochádza k transformácii lepidokrokítu na goethit [2]. Výsledky meraní boli potvrdené ďalšími metódami (rtg difrakčná analýza a rtg mikroanalýza).

Táto práca vznikla s podporou projektu VEGA 1/0747/21.

- [1] Neff D. et al: *J. of Raman Spectroscopy* 37: 1228-1237 (2006).
[2] Wejing Y. et al: *J. of the Electrochemical Society* 163: 289-295 (2016)

7Po06**HYBRID WELDING OF DUPLEX STEELS FOR CHEMICAL REACTORS**Jaroslav Bruncko^{a)}, Miroslav Michalka^{a)}, Michal Simek^{b)}, Andrej Vincze^{a)}, Rastislav Ormandy^{b)}, Tomas Szewczyk^{b)}

^{a)} Internatinal Laser Center SCSTI, Lamačská cesta 8/A, 811 04 Bratislava, Slovak Republic

^{b)} First Werlding Company, Kopčianska 14, 851 01 Bratislava, Slovak Republic

Duplex steels represent an important group of materials for chemical reactor designing. In comparison with traditionally used austenitic steels they exhibit some special features which provide advantages in this speciality. However joining of duplex steels is still challenging task. Hybrid welding in combination TIG-laser is a relatively new method which combines properties of traditional arc welding methods and laser welding in a single process. The contribution deals with the experimental results of the duplex steel of grade EN 1.4462 with 1 and 2 mm of thicknesses. The welding process was investigated in both arrangements (process leading source TIG or laser) and no filler wire was used.

Acknowledgement

This work was supported by the Slovak Research and Development agency under the contracts APVV-0224-18 (Research of laser-TIG hybrid welding in mode of pulses synchronization of welding sources)

7Po07**„ZELENÉ“ KOMPOZÍCIE VÝBUŠNÍN**Milan Olšovský¹, Milan Krištof¹, Petr Kuna²

¹ZVS IMPEX, a. s. Štúrova 925/27, 018 41 Dubnica nad Váhom

²STC, s. r. o. Hlinky 505/118, 603 00 Brno

Sprísňujúcej sa legislatíve v oblasti používania a nakladania s chemickými látkami sa nevyhýba ani oblasť výbušnín. Ich výroba a spracovanie tiež prechádza premenami. Upravujú sa nielen technológie, ale aj samotné zloženia, ktoré musia spĺňať čoraz prísnejšie environmentálne požiadavky.

Medzi výbušniny zaraďujeme traskaviny, pyrotechnické zložé, streliviny, trhaviny. Každá skupina výbušnín má svoje charakteristické vlastnosti a špecifické použitie. Naša práca je zameraná na traskaviny a pyrotechnické zložé, kde postupne prichádza k reformulácii kompozícií tak, aby obsahovali len látky, ktoré sú prijateľné z environmentálneho hľadiska. Väčšina

je používaná od 50. – 60. rokov minulého storočia prakticky bez zmeny a obsahujú už nevhodné látky (napr. zlúčeniny olova, chrómu, bária).

V nových „zelených“ kompozíciách traskavín a pyrotechnických zloží boli nevyhovujúce zložky substituované z hľadiska životného a pracovného prostredia prijateľnými zlúčeninami, alebo boli naformulované úplne nové zloženia. Pripravené výbušniny boli podrobené náročným testom, aby mohli byť plnohodnotnými náhradami v civilnom (hasiace zariadenia, airbagy) a obrannom priemysle (zapaľovače munície, stopovky, iniciátory).



Príspevok vznikol v rámci projektu „Ekologicky prijateľné energetické materiály spĺňajúce požiadavky REACH“ podporeného v rámci Európskeho fondu regionálneho rozvoja INTERREG V-A SK-CZ.

7Po8

STUDIUM VLIVU REAKČNÍCH PODMÍNEK NA KONVERZNÍ REAKCI SÍRANU ŽELEZNATÉHO S HYDROXIDEM HOŘEČNATÝM

Kateřina Bednářová¹, Jan Videnský¹, Ivona Sedlářová¹, Martin Zlámal¹

¹Ústav anorganické technologie VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, Katerina.Bednarova@vscht.cz

Práce navazuje na studii přepracování síranu železnatého pomocí oxidu hořečnatého, při které bylo zjištěno, že průběh procesu je výrazně ovlivněn souběžně probíhající reakcí hydratace oxidu hořečnatého. Z tohoto důvodu byl pro další práci použit hydroxid hořečnatý. V tomto příspěvku jsou shrnuty výsledky experimentální studie reakce síranu železnatého s hydroxidem hořečnatým, která byla zaměřena na proveditelnost a vliv reakčních podmínek na průběh reakce. Konkrétně byly sledovány hydrodynamické podmínky, způsob dávkování $Mg(OH)_2$, výchozí koncentrace $FeSO_4$ a teplota. Experimenty byly provedeny v izotermním vsádkovém reaktoru s odběrem vzorků v požadovaných časových intervalech. Stupeň konverze hořčičku byl stanoven analýzou kapalné fáze pomocí ICP metody.

Bylo zjištěno, že reakce s hydroxidem hořečnatým probíhá pomaleji a do nižších stupňů konverze než u reakce s oxidem hořečnatým. Z výsledků vyplynulo, že na reakci nemá velký

vliv, je-li hydroxid hořečnatý dávkován v pevné fázi nebo ve formě vodné suspenze. Naopak hydrodynamické podmínky, výchozí koncentrace síranu železnatého a teplota průběh reakce a dosažený stupeň konverze hořčičku ovlivňují.

Tento výstup vznikl v rámci projektu Specifického vysokoškolského výzkumu – projekt č. A2_FCHT_2021_070.

7Po09

KERATIN MODIFIED BY THERMAL HEATING AS A SCAVENGER OF FORMALDEHYDE

Ján Matyašovský¹, Peter Jurkovič¹, Peter Duchovič¹, Igor Novák²

¹VIPO, a.s., Partizánske, Slovakia.

jmatyasovsky@vipo.sk

²Ústav polymérov SAV, 845 41 Bratislava, Slovakia

At present, polycondensation urea-formaldehyde (UF) resins are the most widely used wood gluing adhesives, but their main disadvantage is their low resistance to water and moisture, which causes the subsequent release of formaldehyde emissions from finished products[1]. The aim of the study was to reduce the release of formaldehyde from wood materials by developing and testing new, more effective modifiers that bind formaldehyde or form more stable methylene bonds during polycondensation.

Research was focused on the biopolymer keratin which can be found in hair, feather, wool, nails, hoofs, horns etc. For this study keratin samples were prepared from crushed horns by thermal heating during 1 hour at various temperatures from 150 °C to 197 °C. (XPS) Ray photoelectron spectroscopy analyses were used to identify changes in their surface chemical structure. The XPS spectrum of keratin samples has been shown to depend on the temperature of their thermal degradation, with the total amount of carbon, nitrogen and sulphur increasing with increasing temperature. For sulphur, the total amount of its reduced form expressed as sulphide also increases, while the total amount of oxygen decreases with increasing temperature. Technical applications have focused on the application of keratin samples to modify mixtures of urea-formaldehyde (UF) resins to reduce the release of formaldehyde from glued wood-based panels[2].

Formaldehyde emissions were assessed from five-layer plywood according to JIS A 1460 (2001) “Desiccator method” [3]. Measured values of extinctions of tested samples confirmed the decrease of formaldehyde emissions for each

concentration of keratin samples prepared by heating from 150°C to 197°C in comparison with the reference sample.

***Acknowledgements:** The authors are grateful for financial support to the Slovak Research and Development Agency projects No. APVV-15-0124, APVV-16-0177, APVV-17-0456, APVV-18-0378 and APVV-19-0269.*

- [1] Buljan J., et al.: Mass Balance in Leather Processing. In: Centenary Congress of the IULCS, 138-156, (1997).
- [2] Matyašovský, J., et al. *JALCA*, 114, 20-28, (2019).
- [3] Bekhta, P., et al. *European Journal of Wood and Wood Products*, 77, 495-508, (2019).

AUTORSKÝ INDEX

A

| | |
|----------------------------|---------------|
| Absolínová H. | 253 |
| Adamová N. | 148 |
| Aguedo J. | 86 |
| Achimovičová M. | 99, 107, 189 |
| Aissa B. S. | 153 |
| Albuquerque L. J. C. | 241 |
| Almáši M. | 126, 192 |
| Ambati R. | 98 |
| Ambrová M. | 149, 258 |
| Ambrožová Říhová J. | 196 |
| Andicsová-Eckstein A. | 244 |
| Androvič L. | 135 |
| Andrys R. | 213, 218, 229 |
| Antal R. | 206 |
| Arion V. B. | 188 |
| Asher J. | 182 |

B

| | |
|----------------------|--------------------|
| Babič M. | 135 |
| Bačáková L. | 203 |
| Bajcura M. | 180 |
| Bakandritsos A. | 196 |
| Bakardžiev N. | 178 |
| Bakhanovich O. | 121 |
| Balarynová J. | 166 |
| Baláž M. | 99, 139, 246 |
| Baláž P. | 99 |
| Balučová S. | 75, 154, 181 |
| Baráth P. | 164, 172, 184, 248 |
| Barbieriková Z. | 156 |
| Barek J. | 152 |
| Baron D. | 79 |
| Barták P. | 170, 174 |
| Bartas M. | 159, 239 |
| Bartoňová L. | 165 |
| Bastien G. | 96 |
| Baszczyński O. | 119, 177 |
| Baudoin O. | 207 |
| Bednárek J. | 239 |
| Bednářová M. | 256 |
| Bednář P. | 166 |
| Bednářová K. | 260 |
| Bedrnová E. | 243 |
| Beier P. | 121, 122 |
| Bělinová T. | 133 |

| | |
|----------------------|-------------------------|
| Bellová R. | 73, 85 |
| Belza J. | 196 |
| Beneš P. | 236 |
| Benešová L. | 73 |
| Benická B. | 167 |
| Benkocká M. | 203 |
| Benkšová M. | 257 |
| Benková A. | 176 |
| Berkeš D. | 112, 119, 212, 218, 227 |
| Bernhart Ch. | 158 |
| Bertók T. | 84, 85, 168, 176 |
| Bílek M. | 236, 237 |
| Bláhová E. | 73 |
| Blaško J. | 159, 166 |
| Blaško M. | 93 |
| Blaškovičová J. | 74 |
| Bleha T. | 87 |
| Blšáková A. | 157 |
| Boča M. | 98, 102, 104, 255 |
| Boča R. | 104, 105 |
| Bodík I. | 129, 256 |
| Boháček Š. | 149 |
| Boháčiková N. | 214 |
| Boldišová E. | 255 |
| Bondarev D. | 118 |
| Borovská L. | 169 |
| Borská K. | 118 |
| Bortňák D. | 122, 220, 225 |
| Boudová H. | 160 |
| Bouzek K. | 145, 146, 147, 148, 150 |
| Bracic U. | 158 |
| Brachňáková B. | 103, 117, 161 |
| Brezovan M. | 189 |
| Brož B. | 206 |
| Brožek V. | 198, 201 |
| Bruncko J. | 259 |
| Brus J. | 133 |
| Brůža Z. | 206 |
| Buček A. | 91 |
| Bučinský L. | 183 |
| Budáč D. | 148 |
| Bulko F. | 113 |
| Burešová M. | 240 |
| Butsyk O. | 94 |
| Bůzek F. | 240, 243 |
| Bystrický S. | 184 |

C

| | |
|---------------------------------|---------------|
| Cakl J. | 252 |
| Caletková O. | 112, 218, 227 |
| Campopiano J. D. | 231 |
| Capková D. | 90 |
| Carda M. | 148 |
| Casas-Luna M. | 246 |
| Catanante G. | 153 |
| Cechová Zajacová M. | 166, 174 |
| Cesla P. | 218 |
| Cibulková Z. | 180, 186 |
| Cifra P. | 87 |
| Cigán M. | 117, 221, 222 |
| Cígler P. | 194 |
| Císařová I. | 101, 109, 110 |
| Clemenceau A. | 207 |
| Cmuntova N. | 218 |
| Cordeiro Soeiro Dias N. M. | 183 |
| Cruz Francisci G. J. | 239 |
| Cuhorka J. | 247 |
| Culková E. | 73, 85 |
| Cuřínová P. | 172, 173 |
| Czére I. | 92 |

Č

| | |
|--------------------------|---------------|
| Čabala R. | 163 |
| Čacho F. | 130 |
| Čákyová V. | 155 |
| Čaplovič E. | 88 |
| Čarný T. | 207, 211, 219 |
| Čechová Mužíková L. | 117, 222 |
| Čejková B. | 240, 243 |
| Čekan P. | 68 |
| Černá A. | 191 |
| Černák J. | 193, 200, 201 |
| Černičková I. | 88 |
| Černocho P. | 137, 142, 241 |
| Černochová Z. | 137, 241 |
| Červeň J. | 159, 239, 242 |
| Červenková A. | 257 |
| Červený D. | 135 |
| Čierna M. | 112 |
| Čigaš M. | 90 |
| Čižmár E. | 193 |
| Čížová A. | 184 |
| Čmelová P. | 112 |
| Čobejová O. | 148 |
| Čurn V. | 159, 239 |

D

| | |
|----------------------|---------------|
| Dakošová O. | 83, 161 |
| Dammer J. | 251 |
| Daňhel A. | 78 |
| Danielik V. | 149, 258 |
| Danko M. | 138, 142, 245 |
| Daňo M. | 144, 202 |
| Datta S. | 116 |
| Degano I. | 72 |
| Dejmková H. | 160, 171 |
| Denk K. | 146 |
| Derco J. | 130 |
| Detková K. R. | 119, 212 |
| Dlháň E. | 105, 189 |
| Dobiašová H. | 242 |
| Dobrijević Z. | 83 |
| Dobrovodský D. | 78 |
| Doležal K. | 213, 228, 234 |
| Donovalová J. | 232 |
| Doris E. | 244 |
| Doušová B. | 240, 243, 249 |
| Dračínský M. | 117, 222 |
| Drahoš B. | 98, 236 |
| Drakselová M. | 147 |
| Drienovský M. | 88 |
| Drtinová B. | 240 |
| Dubaj T. | 180, 186 |
| Duháčková E. | 159, 166 |
| Duchovič P. | 258, 260 |
| Dulanská S. | 255 |
| Dupeyre G. | 89 |
| Durdiak J. | 85 |
| Đuriška L. | 88 |
| Đurovič M. | 146 |
| Dušek L. | 130, 247, 248 |
| Dušek M. | 200 |
| Dvorštiaková K. | 92 |
| Dydowiczová A. | 253 |

E

| | |
|------------------|-----|
| Eckstein A. | 118 |
| Elečko J. | 235 |
| Etrych T. | 253 |

F

| | |
|---------------------|----------|
| Fabián M. | 228 |
| Fabiánová D. | 228 |
| Fabišíková M. | 228 |
| Fakis M. | 223, 224 |
| Falvello L. R. | 193 |

| | |
|----------------------------|--------------------|
| Fang J. | 253 |
| Fašková L. | 130, 243 |
| Fedorková Straková A. | 90 |
| Fedoročko P. | 115 |
| Fekete L. | 75, 154 |
| Fenclová K. | 143 |
| Feriancová L. | 120 |
| Ferko B. | 119, 212 |
| Fiedler J. | 72 |
| Filipová M. | 135, 137, 253 |
| Filo J. | 117, 119, 221, 222 |
| Findoráková L. | 246 |
| Fischer J. | 75, 154, 171, 181 |
| Fischer R. | 117 |
| Fischer-Fodor E. | 195 |
| Fohlerová Z. | 249 |
| Fojta M. | 77, 78, 81, 173 |
| Folprechtová D. | 161 |
| Franc M. | 109 |
| Fraňová P. | 123 |
| Fresser L. | 229 |

G

| | |
|---------------------------|-------------------------|
| Gáborová K. | 189 |
| Gabrišová E. | 159, 166 |
| Gadermaier B. | 107 |
| Gajdošová Pinková V. | 168 |
| Gál M. | 83, 150, 161 |
| Galamboš M. | 164, 202, 204 |
| Galek V. | 191 |
| Gálicová T. | 83 |
| Galusek D. | 93 |
| Ganajová M. | 126, 127 |
| Gáplovský A. | 232 |
| Garberová M. | 209 |
| García Gallardo M. | 177 |
| Gasior J. | 89 |
| Gašparová M. | 209 |
| Gautschi P. | 143 |
| Gavenda M. | 210 |
| Gembický M. | 105 |
| Georgiou D. | 223, 224 |
| Gerhátová Ž. | 92 |
| Gettler J. | 211 |
| Giacomelli F. C. | 241 |
| Giampaglia D. | 73 |
| Gilar M. | 76 |
| Gligorijević N. | 83 |
| Gökçe G. | 153 |
| Gonda J. | 232, 235 |
| Gorejová R. | 92, 95, 155, 162 |
| Gracza T. | 210, 211, 214, 216, 219 |

| | |
|----------------------|-----|
| Grambličková L. | 181 |
| Gravel E. | 244 |
| Grmela J. | 253 |
| Groborz O. | 252 |
| Grúz J. | 234 |
| Gubóová A. | 89 |
| Gucký T. | 217 |
| Gurská M. | 244 |
| Gyepes R. | 224 |

H

| | |
|-----------------------|--------------------|
| Hadrava J. | 191 |
| Hainová K. | 84 |
| Hajdúch M. | 194 |
| Hajdúchová Z. | 99 |
| Halaj M. | 149 |
| Hallon L. | 125 |
| Hamuľáková S. | 126 |
| Hanigovský Š. | 90 |
| Harmach P. | 109 |
| Harmošová M. | 190 |
| Haššo M. | 80, 176 |
| Hatokova S. | 90 |
| Ház A. | 256 |
| Heger T. | 217 |
| Heger Z. | 229 |
| Heizer T. | 133 |
| Hejna O. | 239 |
| Held L. | 124 |
| Herchel R. | 98 |
| Herynek V. | 133 |
| Hesko O. | 81 |
| Hill Jonathan P. | 95 |
| Híreš M. | 84 |
| Híveš J. | 130, 150, 243, 257 |
| Hnát J. | 145, 146 |
| Hoang S. | 244 |
| Hocek M. | 71 |
| Hofmanova T. | 213 |
| Hochvaldová L. | 190, 196, 202 |
| Hološ A. | 118 |
| Holub M. | 193 |
| Holubova M. | 90 |
| Hon Z. | 236 |
| Honzíček J. | 137, 251 |
| Hoogenboom R. | 252 |
| Horáková L. | 253 |
| Horký F. | 101 |
| Horníček J. | 191 |
| Horváth B. | 217, 220 |
| Hovoráková M. | 252 |
| Hradilová Š. | 191 |

| | |
|--|---------------|
| Hrčka R. | 159, 166 |
| Hrdina R. | 120 |
| Hrdlička V. | 77 |
| Hricovíni M. | 182 |
| Hricovíniová J. | 212 |
| Hricovíniová Z. | 212 |
| Hrobárik P. | 223, 224, 230 |
| Hroboňová K. | 75, 178 |
| Hromadová M. | 89, 96 |
| Hrončeková Š. | 85, 168 |
| Hrubý M. 90, 131, 133, 135, 136, 137, 142, 240, 244, 252 | |
| Hrůzová M. | 253 |
| Hubáček T. | 204 |
| Huntošová V. | 116 |

CH

| | |
|--------------------|---------|
| Chavhan M. | 108 |
| Chocholouš P. | 174 |
| Chochulová A. | 242 |
| Choińska M. | 171 |
| Chovanec M. | 84 |
| Christl M. | 143 |
| Chroustová K. | 236 |
| Chýlková J. | 82, 169 |

I

| | |
|-----------------|-----|
| Ihnát V. | 149 |
| Imreová Z. | 246 |
| Imrich J. | 209 |
| Ingr T. | 162 |
| Ismael I. | 245 |

J

| | |
|--------------------------|-------------------------|
| Jablonský M. | 75, 256 |
| Jačková I. | 240, 243 |
| Jaklová Dlasková K. | 214 |
| Jakubec P. | 112, 119, 212, 218, 233 |
| Jakubek J. | 251 |
| Jampílek J. | 212 |
| Janata M. | 102 |
| Jancura D. | 116 |
| Jančálek J. | 101, 103 |
| Jančiová E. | 227 |
| Jand'ourek O. | 233 |
| Jáné E. | 84, 172, 184 |
| Janeba Z. | 117, 222 |
| Janecký L. | 121 |
| Janíková L. | 82 |
| Janoušková O. | 135 |

| | |
|----------------------|-------------------|
| Janovec J. | 88 |
| Janovec L. | 115 |
| Jansa J. | 217 |
| Jäger A. | 240, 241 |
| Jäger E. | 240, 241 |
| Jelšíková K. | 73, 163 |
| Jendželovský R. | 115 |
| Jerga R. | 174 |
| Jerigová M. | 91, 181, 183, 184 |
| Jiráček D. | 135 |
| Jiroušková E. | 163 |
| John J. | 125 |
| Jomová K. | 156 |
| Jorda R. | 217 |
| Josypčuk B. | 152 |
| Juračka D. | 164 |
| Juráková J. | 103 |
| Jurečková M. | 126 |
| Jurišová J. | 139, 149, 258 |
| Jurkovič P. | 258, 260 |

K

| | |
|------------------------------|-----------------------|
| Kabeláč M. | 78 |
| Kadlec J. | 252 |
| Kadlecová Z. | 76, 160 |
| Kaimlová J. | 204 |
| Kalendová A. | 140, 141 |
| Kaleta J. | 96 |
| Kalcher K. | 155, 158 |
| Kalíková K. | 76, 160, 161 |
| Kalina J. | 127 |
| Kamenická B. | 113, 132, 245 |
| Karásková A. | 129 |
| Karim R. | 118 |
| Kasák P. | 70, 84, 136, 142, 168 |
| Kasálková Slepíčková N. | 199 |
| Katrlík J. | 83, 164, 172, 178 |
| Kelnar I. | 102 |
| Kerekeš K. | 150 |
| Keša P. | 252 |
| Kianičková K. | 83, 164, 178 |
| Kinnertová E. | 108, 192 |
| Király N. | 192 |
| Kittnerová J. | 240 |
| Kleinová A. | 138, 258 |
| Klimša L. | 75, 154 |
| Klos D. | 213 |
| Klouda J. | 73, 163 |
| Kmeťová J. | 126 |
| Kobera L. | 133 |
| Kobza J. | 141 |
| Kocábová J. | 72 |

| | |
|----------------------|-------------------------|
| Kodým R. | 146, 150 |
| Kohoutková M. | 201 |
| Kohoutova Z. | 213 |
| Kolarič L. | 132 |
| Kolář K. | 237 |
| Kolář M. | 190, 202 |
| Kolářová H. | 254 |
| Kolivoška V. | 89, 94, 171 |
| Kollár J. | 118, 136 |
| Kollau A. | 158 |
| Kolouchová K. | 90, 252 |
| Kolská Z. | 199, 203 |
| Komárková B. | 78 |
| Konečná K. | 214, 233 |
| Konefál R. | 133, 241 |
| Konefál R. | 135 |
| Konhefr M. | 249 |
| Konkořová E. | 115 |
| Koós P. | 210, 211, 214, 216, 219 |
| Kopeček J. | 75, 154 |
| Kopp R. | 253 |
| Kořená L. | 108, 193 |
| Košovan P. | 142 |
| Koštůr R. | 259 |
| Kotrlé K. | 98 |
| Kotuláková K. | 124 |
| Koutník I. | 239 |
| Kováčová M. | 138, 140, 246 |
| Kovalčík A. | 138 |
| Kovár F. | 165 |
| Kozlík P. | 170 |
| Kozmon S. | 184 |
| Kožárová B. | 246 |
| Kožišek J. | 96 |
| Kožurková M. | 115 |
| Králik M. | 139, 149, 258 |
| Královič D. P. | 247 |
| Kramplová Z. | 179 |
| Krascsenits Z. | 164 |
| Krátký M. | 214, 226, 233 |
| Kratochvíl O. | 206 |
| Krejčí P. | 166 |
| Krejčová A. | 169 |
| Krešáková L. | 193 |
| Křištof M. | 259 |
| Křištofiková D. | 215 |
| Kronek J. | 116, 153 |
| Kroneková Z. | 116, 142, 153 |
| Krüger Ch. | 105 |
| Krunclová T. | 252 |
| Krupa I. | 142 |
| Krupková O. | 247 |
| Kryštof V. | 217 |

| | |
|---------------------|-----------------------------------|
| Kubešová J. | 73 |
| Kubíková B. | 102, 255 |
| Kubíková M. | 194 |
| Kubincová J. | 159, 166 |
| Kubinec R. | 159, 166 |
| Kučera L. | 162 |
| Kučera T. | 252 |
| Kučka J. | 133, 136 |
| Kuchár J. | 200, 201 |
| Kuchtová G. | 130, 248 |
| Kuna P. | 259 |
| Kuncová N. | 190 |
| Kundalia P. | 83, 164, 178 |
| Kundrátová K. | 159, 239 |
| Kunštek M. | 159, 166 |
| Kupcová E. | 167 |
| Kurka M. | 101, 103 |
| Kusumkar V. V. | 204 |
| Kutílek Z. | 198 |
| Kutová A. | 203 |
| Kuzderová G. | 107 |
| Kuzielová E. | 99 |
| Kvaková K. | 194 |
| Květoň F. | 157, 167, 172, 248 |
| Kvítek L. | 184, 190, 194, 195, 196, 198, 202 |
| Kvítek O. | 203 |

L

| | |
|-----------------------------|------------------------|
| Labuda J. | 152 |
| Labuta J. | 95 |
| Lacina K. | 80, 177, 249 |
| Laga R. | 135, 253 |
| Lahký S. | 188 |
| Lach M. | 127, 237 |
| Lachmanová Nováková Š. | 89, 94 |
| Lainé Philippe P. | 89 |
| Lalušová T. | 104 |
| Lamata I. | 193 |
| Langmaier J. | 171 |
| Lawrence L. A. | 231 |
| Lemr K. | 162 |
| Leskovská J. | 195 |
| Lhotka M. | 147, 243, 249 |
| Litecká M. | 190 |
| Lobaz V. | 90, 133 |
| Lokaj J. | 215 |
| Lopatka P. | 216 |
| Lorenc D. | 183, 184 |
| Lorencová L. | 86, 157, 168, 172, 176 |
| Löser R. | 206 |
| Loukotová L. | 133 |
| Loureiro K. C. | 240 |

| | |
|-------------------------------|---------------|
| Lowenbergová L. | 255 |
| Ludvík J. | 173 |
| Lukáč M. | 180, 217, 220 |
| Lukáčová-Chomisteková Z. | 73, 85 |
| Lupínková S. | 203 |
| Lyčka A. | 217 |
| Lyutakov O. | 199 |

M

M. 156

| | |
|----------------------------|-------------------------|
| Macejová A. | 228 |
| Macko J. | 95 |
| Macková I. | 104 |
| Mackuľák T. | 129, 150 |
| Macho O. | 159, 166 |
| Machotová J. | 140, 141 |
| Maier V. | 171 |
| Maixnerová J. | 214, 233 |
| Májek M. | 116 |
| Majerčáková I. | 141 |
| Majerčíková M. | 153 |
| Malachova K. | 242 |
| Malatinský T. | 218, 233 |
| Malček M. | 156, 183 |
| Malečková S. | 75, 139 |
| Malina T. | 196 |
| Malinak D. | 213, 218, 229 |
| Mališ J. | 148 |
| Mališová E. | 150, 257 |
| Malý O. | 253 |
| Mandal S. | 75 |
| Marčeková M. | 119, 212 |
| Marek A. | 206 |
| Marek I. | 198, 201 |
| Marchalín Š. | 123 |
| Markos A. | 121, 122 |
| Marková D. | 250 |
| Marková V. | 148 |
| Marković Mandić V. | 83 |
| Markovič M. | 210, 211, 214, 216, 219 |
| Markuliak M. | 217, 220 |
| Márquez-Zavalía M. F. | 189 |
| Maršálek R. | 192 |
| Martinková M. | 223, 228 |
| Marton M. | 82 |
| Marty J. L. | 153 |
| Masař R. | 236 |
| Mastný L. | 147, 191, 196, 198, 201 |
| Matějček P. | 132 |
| Matějka P. | 173 |
| Matějová L. | 239 |
| Matejová M. | 115 |

| | |
|-------------------------|-----------------------------------|
| Matoušková L. | 131 |
| Matselko O. | 104 |
| Matušková E. | 137, 251 |
| Matušková V. | 234 |
| Matvieiev O. | 82, 169 |
| Matyašovský J. | 71, 258 |
| Matyašovský J. st. | 260 |
| Matysová E. | 187 |
| McKenna A. C. | 231 |
| Mečárová J. | 184 |
| Mečiarová M. | 215, 221, 234 |
| Mego M. | 84 |
| Melicharová M. | 236 |
| Melicherčíková D. | 85 |
| Melichová Z. | 141 |
| Melníková E. | 83, 161 |
| Ménová P. | 114 |
| Mészáros G. | 89 |
| Meynen V. | 192 |
| Mičová R. | 105 |
| Mičušik M. | 258 |
| Mihalkovič M. | 88 |
| Michalka M. | 259 |
| Michniak P. | 82, 169 |
| Míka L. | 154, 171 |
| Miklášová N. | 195 |
| Miković Ž. | 83 |
| Mikulášek P. | 129 |
| Mikušová K. | 69 |
| Mikysek T. | 72 |
| Milata M. | 225 |
| Milata V. | 122, 125, 215, 220 |
| Milde D. | 84 |
| Miljuš G. | 83 |
| Miltáková B. | 115 |
| Míndová M. | 144 |
| Místrík M. | 202 |
| Mišíková F. | 169 |
| Miškovský P. | 116 |
| Mládek T. | 237 |
| Mlynáriková J. | 102, 104 |
| Modrocká V. | 221, 234 |
| Modrý A. | 251 |
| Molnárová K. | 170 |
| Molnárová N. | 197 |
| Moncoľ J. | 103, 105, 106, 110, 189, 214, 215 |
| Moravčíková D. | 118 |
| Mortet V. | 75, 154 |
| Mosnáček J. | 118, 136, 138, 225, 244 |
| Mosnáčková K. | 138 |
| Mravec B. | 221 |
| Mudráková B. | 222 |
| Mucha J. | 167 |

| | |
|-----------------|---------------|
| Mucha M. | 192, 254 |
| Müller L. | 93 |
| Musil T. | 147 |
| Musilek K. | 213, 218, 229 |
| Mycak M. | 237 |

N

| | |
|----------------------|---------------|
| Nádvorníková J. | 170 |
| Navrátil I. | 110 |
| Navrátil T. | 77, 82, 171 |
| Nedič O. | 83 |
| Němcová K. | 128 |
| Nemčeková K. | 152, 153 |
| Nemčovič M. | 164, 167, 248 |
| Nemec I. | 98 |
| Němec M. | 125, 143, 144 |
| Němeček M. | 150 |
| Netriová Z. | 102, 104, 255 |
| Niščáková V. | 90 |
| Nixon S. | 200 |
| Nociarová J. | 223, 224, 230 |
| Nosková N. | 72, 187 |
| Noskovičová E. | 183, 184 |
| Novák D. | 78, 82 |
| Novák I. | 258, 260 |
| Novaková J. | 183 |
| Nováková J. | 91, 184 |
| Nováková Š. | 96 |
| Novotná M. | 223 |
| Novotný L. | 129 |
| Nový Z. | 194 |
| Nunhart P. | 115 |

O

| | |
|--------------------|---|
| Olejníková P. | 218 |
| Olšovský M. | 259 |
| Ondra M. | 194 |
| Opletal T. | 162 |
| Orendáč M. | 203 |
| Oriňák A. | 92, 93, 95, 155 |
| Oriňáková R. | 69, 89, 92, 93, 95, 126, 155, 162, 175, 186 |
| Ormandy R. | 259 |
| Orság M. | 184 |
| Ortner A. | 155, 158 |
| Orvoš J. | 108, 117 |
| Ostatná V. | 83 |
| Osuský P. | 223, 224 |

P

| | |
|---------------------------|-----------------------------------|
| Paganová K. | 246 |
| Pachl P. | 217 |
| Paidar M. | 145, 146, 148 |
| Pakanová Z. | 86, 164, 167, 172, 184, 248 |
| Palarčík J. | 252 |
| Palcut M. | 88, 92 |
| Páleš J. M. | 172 |
| Palchikov V. | 226 |
| Pálka K. | 101, 103 |
| Panáček A. | 184, 190, 194, 195, 196, 198, 202 |
| Panáček D. | 196 |
| Pančík F. | 184 |
| Pánek J. | 137, 142 |
| Pankrác J. | 252 |
| Parschová H. | 131 |
| Pathiwada D. | 225 |
| Paul E. | 68 |
| Paúrová M. | 135 |
| Pavilek B. | 122, 215, 220, 225 |
| Pavlik J. | 189 |
| Pavlik V. | 98 |
| Pavlova E. | 133, 241 |
| Pavůková D. | 130, 243 |
| Pažitná L. | 83, 164, 172, 178 |
| Pažitný A. | 149 |
| Pečinka P. | 159, 239 |
| Pečová A. | 74 |
| Pechancová R. | 79 |
| Pechar M. | 253 |
| Pejzlová M. | 181 |
| Pelcová P. | 253 |
| Peňaška T. | 226, 230 |
| Penezić A. | 83 |
| Peřina M. | 217 |
| Petr J. | 79 |
| Petráková M. | 92 |
| Petruš O. | 89, 155, 162, 175 |
| Petřík M. | 194 |
| Pflégr V. | 226 |
| Pierzynová A. | 252 |
| Pilátová Bago M. | 228 |
| Pinčeková L. | 227 |
| Pinkeová A. | 176 |
| Pinková Gajdošová V. | 172 |
| Piroš M. | 106 |
| Pivoňková H. | 173 |
| Plevová M. | 145 |
| Plíhalová L. | 213, 228 |
| Pluháček T. | 79 |
| Podrojková N. | 93 |
| Pola R. | 253 |

| | |
|---------------------|--------------------|
| Poláková K. | 191 |
| Poliaková L. | 248 |
| Polt G. | 200 |
| Polyzos I. | 223, 224 |
| Pompach P. | 135 |
| Pončáková T. | 228 |
| Popelka A. | 136 |
| Pospíšil L. | 96 |
| Pospíšilová Š. | 212 |
| Potočník I. | 190, 209 |
| Poučková P. | 136 |
| Pour M. | 206 |
| Prášek T. | 143 |
| Pratx G. | 133 |
| Pražák P. | 191 |
| Preinerová K. | 197 |
| Prchalova E. | 229 |
| Princík D. | 197 |
| Priputen P. | 88, 92 |
| Procházková E. | 117, 119, 177, 222 |
| Prokop M. | 147 |
| Prucek R. | 184, 194, 195, 198 |
| Průša F. | 198 |
| Pryjmaková J. | 204 |
| Prysiashnyi V. | 200 |
| Psotka M. | 229 |
| Pungjunun K. | 158 |
| Purdešová A. | 179 |
| Putala M. | 113, 120 |

R

| | |
|-----------------------------|----------|
| Raabová H. | 194 |
| Radojičić O. | 83 |
| Radvánska M. | 68 |
| Rafailović L. D. | 200 |
| Rahel J. | 200 |
| Rajnák C. | 104, 105 |
| Rakovský E. | 223 |
| Raouafi N. | 153 |
| Rapta P. | 185 |
| Raschmanová Špaková R. | 223 |
| Rečková V. | 147 |
| Reinis M. | 229 |
| Remešová M. | 246 |
| Rendošová M. | 107, 126 |
| Renz F. | 105 |
| Ridošková A. | 253 |
| Rievaj M. | 73, 85 |
| Robajac D. | 83 |
| Rocaboy R. | 207 |
| Rogala A. | 155 |
| Rohan P. | 198 |

| | |
|-------------------|----------|
| Rohr O. | 200 |
| Rončák R. | 232 |
| Rončević I. | 96 |
| Rousar T. | 218 |
| Ruml O. | 198, 237 |
| Rusek M. | 236 |
| Russ A. | 149 |
| Rybkovala Z. | 242 |
| Rychlý J. | 187 |

Ř

| | |
|--------------------|-----|
| Řezáčová P. | 217 |
| Řezníčková E. | 217 |

S

| | |
|----------------------------|----------------------------|
| Sabol M. | 125 |
| Sahul M. | 88, 92 |
| Sajdl P. | 203 |
| Salvadori K. | 172, 173 |
| Samořová E. | 190 |
| Sarakhman O. | 155, 176 |
| Sedláček O. | 95 |
| Sedlářová I. | 260 |
| Segl'a P. | 189 |
| Sezimová H. | 254 |
| Shah R. | 116 |
| Shepa J. | 69, 162, 175, 186 |
| Shishkanova T. V. | 172 |
| Scherhauser D. | 218 |
| Schimer J. | 194 |
| Schoeller M. | 106 |
| Schwarzová-Pecková K. | 73, 75, 154, 160, 163, 181 |
| Siegel J. | 199, 204 |
| Silliková V. | 255 |
| Silvestro De Irene | 231 |
| Sincari V. | 241 |
| Sisáková K. | 186 |
| Skopalová J. | 170, 171, 174 |
| Skotnicová I. | 149 |
| Skřehot P. A. | 236 |
| Skurikhina O. | 107 |
| Sládková Š. | 160 |
| Slavětinská R. | 196 |
| Slepička P. | 199, 204 |
| Slovák V. | 108, 109, 128, 192 |
| Smolíček M. | 224, 230 |
| Smolko R. | 200 |
| Smolný M. | 252 |
| Smýkal P. | 166 |
| Sochr J. | 152 |
| Sokol J. | 179 |

| | |
|-----------------------|----------|
| Sokoliová S. | 214 |
| Sokolová R. | 72, 163 |
| Solich P. | 174 |
| Sopčák T. | 95, 155 |
| Sopoušek J. | 80, 177 |
| Sotáková I. | 127 |
| Stahorský M. | 246 |
| Staňková L. | 203 |
| Stankovianska K. | 230 |
| Steinerová D. | 140, 141 |
| Stepanenko I. | 188 |
| Strečková M. | 89 |
| Strnad M. | 234 |
| Stupavská M. | 200 |
| Svitková V. | 74, 152 |
| Svobodová J. | 213, 229 |
| Svrčková K. | 175 |
| Sýkora V. | 251 |
| Szabados H. | 231 |
| Szabová P. | 256 |
| Szewczyk T. | 259 |
| Szobi A. | 68 |
| Szöcs V. | 184 |

Š

| | |
|--------------------------|--|
| Šafář P. | 123 |
| Šagátová A. | 108 |
| Šácha M. | 125 |
| Šalingová A. | 248 |
| Šalitraš I. | 103, 108, 117, 161 |
| Šandrejová J. | 126 |
| Šatinský D. | 174 |
| Šauša O. | 247 |
| Šebera J. | 89, 94 |
| Šebesta R. | 112, 215, 221, 222, 226, 230, 231, 234 |
| Šebestová A. | 79 |
| Šefc L. | 136, 251 |
| Šelešovská R. | 82, 169 |
| Šestinová O. | 189 |
| Ševc J. | 115 |
| Šimek Michal | 259 |
| Šimek Miroslav | 201 |
| Šimko P. | 132 |
| Šimková L. | 173 |
| Šimon P. | 119, 177, 180, 186 |
| Šišková Opálková A. | 138 |
| Šišoláková I. | 69, 162, 175, 186 |
| Škácha P. | 189 |
| Škerlová J. | 217 |
| Šlang S. | 101, 103 |
| Šlouf M. | 137 |
| Šnita D. | 150 |

| | |
|----------------------|---------------|
| Šofranko J. | 122 |
| Špaček J. | 81 |
| Špitalská E. | 255 |
| Špitálský Z. | 138, 140, 187 |
| Šrámek J. | 252 |
| Štefčáková M. | 176 |
| Štefková B. | 195 |
| Štěpánek P. | 136, 142, 252 |
| Štěpánková Š. | 175 |
| Štěpnička P. | 101, 109, 110 |
| Šterbinská S. | 201 |
| Štiblariková M. | 231 |
| Štibrány L. | 130, 243 |
| Štolbová D. | 174 |
| Šunderić M. | 83 |
| Šurina I. | 256 |
| Šutý Š. | 149 |
| Švec P. | 88, 113, 252 |
| Švec, Sr. P. | 88 |
| Švecová N. | 176 |
| Švecová P. | 79 |
| Švorc L. | 80, 155, 176 |
| Švorčík V. | 199, 203, 204 |
| Švorec J. | 106 |

T

| | |
|-------------------|-------------------------------------|
| Tarábek J. | 96 |
| Taylor A. | 75, 154 |
| Tekoglu S. | 191 |
| Tesařová E. | 161 |
| Tichotová M. | 119, 177 |
| Tichý D. | 121 |
| Tiňo R. | 256 |
| Tiňo R. | 139 |
| Tisovský P. | 232 |
| Titiš J. | 104 |
| Tkáč J. | 84, 85, 86, 142, 157, 168, 172, 176 |
| Tokár K. | 209 |
| Tokárová Z. | 209 |
| Tomčík P. | 73, 85 |
| Topper M. | 194 |
| Tóthová D. | 164, 202 |
| Trčková K. | 127, 237 |
| Trnková L. | 72, 177, 187 |
| Trojanová E. | 251 |
| Trtúšek M. | 116 |
| Tříšková I. | 72, 187 |
| Turnovská A. | 199 |
| Tvorynska S. | 152 |
| Tvrdoňová M. | 232 |

U

| | |
|------------------|-----|
| Uher M..... | 125 |
| Ulrichová T..... | 134 |
| Urban I..... | 254 |

V

| | |
|---------------------|---------------|
| Vacek J..... | 78, 82 |
| Vala R..... | 147 |
| Valachová D..... | 218, 233 |
| Valentová J..... | 195 |
| Valíček M..... | 91 |
| Valko M..... | 156 |
| Válková L..... | 196, 202 |
| Váňová J..... | 218 |
| Vargová J..... | 115 |
| Vargová Z..... | 107, 126 |
| Varháč R..... | 126 |
| Varjúová D..... | 129, 256 |
| Vavrek F..... | 94 |
| Večeřová R..... | 190, 196, 202 |
| Végh D..... | 122, 220, 225 |
| Velázquez J. J..... | 93 |
| Velič D..... | 91, 183, 184 |
| Velychkivska N..... | 95 |
| Venhart M..... | 87 |
| Vetrik M..... | 133, 137 |
| Veverková E..... | 231 |
| Věžník J..... | 177, 249 |
| Vídenský J..... | 260 |
| Víglaský V..... | 126 |
| Viglašová E..... | 202, 204 |
| Vilková M..... | 209 |
| Vincze A..... | 259 |
| Vinklárek J..... | 137, 251 |
| Vinšová J..... | 214, 226, 233 |
| Višňovský J..... | 159, 166 |
| Vít M..... | 135 |
| Vizárová K..... | 139, 149, 258 |
| Vlček M..... | 101, 103 |
| Vockenhuber C..... | 143 |
| Vojs M..... | 82, 169 |
| Vokatá B..... | 204 |
| Voller J..... | 234 |
| Voltrová S..... | 121, 122 |
| Vosáhlo P..... | 109 |
| Votočková K..... | 175 |
| Vretenár V..... | 130 |

| | |
|-------------------|----------|
| Vrška M..... | 169 |
| Výbohová V..... | 178 |
| Vyhnálek S..... | 202 |
| Vykydalová A..... | 180, 187 |
| Vyskočil T..... | 210, 214 |

W

| | |
|--------------------|---------------|
| Wawrzyńska E..... | 90 |
| Weidlich T..... | 113, 132, 245 |
| Wenninger N..... | 155, 158 |
| Werner A..... | 193 |
| Wilkening R..... | 107 |
| Williams O. A..... | 75 |
| Woldřichová L..... | 135 |
| Wondraczek L..... | 93 |

Y

| | |
|------------------|-----|
| Yankovych H..... | 246 |
|------------------|-----|

Z

| | |
|---------------------|---------------|
| Zahoranová A..... | 153 |
| Zahradníková B..... | 234 |
| Záchenská J..... | 145 |
| Zain G..... | 118 |
| Zakhar R..... | 130 |
| Zalibera M..... | 188 |
| Zatloukal M..... | 213, 228, 234 |
| Zatloukalová M..... | 78, 82 |
| Zeleňák V..... | 197 |
| Zelenka T..... | 108, 109 |
| Zelenková G..... | 108, 109 |
| Zelenský M..... | 73, 75 |
| Zemanová M..... | 145, 259 |
| Zhukouskaya H..... | 137 |
| Ziólkowska N..... | 135 |
| Zlámal M..... | 260 |
| Zoufalý P..... | 98 |
| Zuskáčová P..... | 242 |

Ž

| | |
|-----------------|----------|
| Žemlička M..... | 99 |
| Žitka J..... | 145, 146 |
| Žitňan M..... | 93 |