75. ZJAZD CHEMIKOV

4. – 8. september 2023
Vysoké Tatry, Horný Smokovec

HLAVNÍ ORGANIZÁTORI

Slovenská chemická spoločnosť a Česká společnost chemická

ORGANIZAČNÝ VÝBOR

Predsedníčka: **Monika Jerigová**
Vedecký tajomník: **Ľubomír Švorc**
Hospodárka: **Michaela Halinkovičová**
Výkonný tajomník: **Miroslav Michalka**
Technický tajomník: **Michal Procházka**
Organizátor za ČSCH: **Tomáš Navrátil**

PROGRAMOVÝ VÝBOR

doc. RNDr. Monika Jerigová, PhD.
Slovenská chemická spoločnosť

prof. Ing. Ľubomír Švorc, DrSc.
Slovenská chemická spoločnosť

prof. Ing. Peter Šimon, DrSc.
Slovenská chemická spoločnosť

prof. Ing. Viktor Milata, DrSc.
Slovenská chemická spoločnosť

doc. Ing. Zuzana Cibulková, PhD.
Slovenská chemická spoločnosť

Ing. Roman Fišera, PhD.
Slovenská chemická spoločnosť

doc. RNDr. Robert Góra, PhD.
Slovenská chemická spoločnosť

prof. Ing. Ján Moncoľ, DrSc.
Slovenská chemická spoločnosť

prof. RNDr. Renáta Oriňaková, DrSc.
Slovenská chemická spoločnosť

RNDr. Michal Procházka, PhD.
Slovenská chemická spoločnosť

doc. Ing. Ivan Šalitroš, PhD.
Slovenská chemická spoločnosť

doc. RNDr. Eva Viglašová, PhD.
Slovenská chemická spoločnosť

doc. RNDr. Milan Drábik, PhD.
Slovenská chemická spoločnosť

RNDr. Dalma Gyepesová, CSc.
Slovenská chemická spoločnosť

prof. RNDr. Magdaléna Bálintová, PhD.
Technická univerzita v Košiciach

doc. RNDr. Andrej Boháč, CSc.
Univerzita Komenského v Bratislave

Mgr. Martin Danko, PhD.
Slovenská akadémia vied v Bratislave

doc. RNDr. Mária Ganajová, CSc.
Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach

RNDr. Slávka Hamuľaková, PhD.
Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach

Ing. Ján Hirsch, DrSc.
Slovenská akadémia vied v Bratislave

doc. PaedDr. Katarína Kotuľáková, PhD.
Trnavská univerzita v Trnave

Ing. Elena Kulichová
Stredná odborná škola Nováky

doc. Ing. Tomáš Mackuľak, PhD.
Slovenská technická univerzita v Bratislave

doc. RNDr. Martin Putala, PhD.
Univerzita Komenského v Bratislave

doc. Ing. Milena Reháková, PhD.
Slovenská technická univerzita v Bratislave

doc. RNDr. Katarína Reiffová, CSc.
Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach

prof. Ing. Štefan Schmidt, PhD.
Slovenská technická univerzita v Bratislave

prof. Mgr. Radovan Šebesta, DrSc.
Univerzita Komenského v Bratislave

prof. RNDr. Nadežda Števulová, PhD.
Technická univerzita v Košiciach

doc. Ing. Radko Tiňo, PhD.
Slovenská technická univerzita v Bratislave

prof. Ing. Michal Uher, DrSc.
Slovenská technická univerzita v Bratislave

doc. RNDr. Zuzana Vargová, PhD.
Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach

prof. Ing. Dušan Velič, DrSc.
Univerzita Komenského v Bratislave

RNDr. Beata Vranovičová, PhD.
Univerzita sv. Cyrila a Metoda v Trnave

RNDr. Lenka Lorencová, PhD.
Slovenská akadémia vied v Bratislave

PROGRAM 75. ZJAZDU CHEMIKOV

Pondelok 4. 9. 2023

13:00 – 19:00	Príchod účastníkov, registrácia a ubytovanie, recepcia hotela Bellevue
19:00 – 22:00	Uvítací večierok, hotel Bellevue

Utorok 5. 9. 2023

09:00 – 10:00	Slávnostné otvorenie Zjazdu, príhovory hostí, sála Grand Bellevue
10:00 – 11:00	Plenárna prednáška: Phillip Kukura
11:00 – 12:00	Ocenenia SChemS, sála Grand Bellevue
12:00 – 14:00	Obed, hotel Bellevue
14:00 – 18:00	Prednášky, hotel Bellevue
18:00 – 20:00	Večera, hotel Bellevue
20:00 – 23:00	Posterové prezentácie a vínny večer, hotel Bellevue

Streda 6. 9. 2023

08:30 – 12:00	Prednášky, Cena Marty Sališovej, hotel Bellevue
12:00 – 14:00	Obed, hotel Bellevue
14:00 – 18:00	Prednášky, Cena Marty Sališovej, hotel Bellevue
18:00 – 20:00	Večera, hotel Bellevue
20:00 – 21:00	Diskusia členov Schems a ČSCH o vzájomnej spolupráci, salónik Krystal
20:00 – 23:00	Posterové prezentácie a pivný večer, hotel Bellevue

Štvrtok 7. 9. 2023

08:30 – 12:00	Prednášky, hotel Bellevue
12:00 – 14:00	Obed, hotel Bellevue
14:00 – 18:00	Voľné poobedie
18:00 – 20:00	Večera
19:00 – 23:59	Slávnostný večierok, vyhodnotenie posterovej súťaže, hotel Bellevue

Piatok 8. 9. 2023

09:00 – 12:00	Prednášky, hotel Bellevue
12:00 – 14:00	Obed, hotel Bellevue

SEKCIE ZJAZDU A GARANTI

Sekcia 1 – Analytická chémia
prof. Ing. Ľubomír Švorc, DrSc.

Sekcia 2 – Fyzikálna chémia
prof. Ing. Peter Šimon, DrSc.

Sekcia 3 – Anorganická a materiálová chémia
doc. Ing. Ivan Šalitroš, PhD.

Sekcia 4 – Organická chémia
doc. RNDr. Martin Putala, PhD.

Sekcia 5 – Vyučovanie a história chémie
doc. PaedDr. Katarína Kotuľáková, PhD.

Sekcia 6 – Aplikovaná chémia, životné prostredie a polyméry
doc. Ing. Radko Tiňo, PhD.

Sekcia 7 – Chemprogress – chemické technológie
prof. Ing. Ján Híveš, PhD.

Garant súťaže posterov
doc. Ing. Zuzana Cibulková, PhD.

PLENÁRNA PREDNÁŠKA

PLP	**Philipp Kukura**	Mass photometry: weighing molecules with light

ZOZNAM POZVANÝCH PREDNÁŠOK

PP1	**Milena Reháková**	Úloha chémie a materiálových analýz v procesoch ochrany kultúrneho dedičstva
PP2	**Zuzana Vargová**	Biologický potenciál koordinačných zlúčenín zinku a striebra
PP3	**Dušan Galusek**	Môže nám sklo pomôcť v boji proti baktériám rezistentným na antibiotiká?
PP4	**Mária Mastihubová**	Prínos enzymatickej acylácie ku syntéze prírodných glykofenolík
PP5	**Karolina Schwarzová**	Borem dopovaný diamant: Perspektivy “netradičního” elektrodového materiálu po třiceti letech výzkumu

SPONZORI 75. ZJAZDU CHEMIKOV

HLAVNÍ SPONZORI

SPONZORI

MEDIÁLNY SPONZOR

OBSAH
ZOZNAM PREDNÁŠOK A POSTEROV PODĽA SEKCIÍ

SPONZORI 75. ZJAZDU CHEMIKOV 42

Plenárna prednáška 58

UNRAVELLING BIOMOLECULAR STRUCTURE, INTERACTIONS AND DYNAMICS WITH MASS PHOTOMETRY
Philipp Kukura 58

Pozvané prednášky 58

PP1 ÚLOHA CHÉMIE A MATERIÁLOVÝCH ANALÝZ V PROCESOCH OCHRANY KULTÚRNEHO DEDIČSTVA
Milena Reháková 58

PP2 BIOLOGICKÝ POTENCIÁL KOORDINAČNÝCH ZLÚČENÍN ZINKU A STRIEBRA
Zuzana Vargová 59

PP3 MÔŽE NÁM SKLO POMÔCŤ V BOJI PROTI BAKTÉRIÁM REZISTENTNÝM NA ANTIBIOTIKÁ?
Dušan Galusek 60

PP4 PRÍNOS ENZYMATICKEJ ACYLÁCIE KU SYNTÉZE PRÍRODNÝCH GLYKOFENOLÍK
Mária Mastihubová 60

PP5 BOREM DOPOVANÝ DIAMANT: PERSPEKTIVY "NETRADIČNÍHO" ELEKTRODOVÉHO MATERIÁLU PO TŘICETI LETECH VÝZKUMU
Karolina Schwarzová-Pecková, Simona Baluchová, Hana Dejmková, Jan Fischer, Jan Hrabovský, Nadezhda Bulgakova, Miroslav Fojta, O. A. Williams, Petr Ashcheulov,Andrew Taylor 61

Prednášky - Sekcia 1: Analytická chémia 62

1P01 BIOCHAR AKO PERSPEKTÍVNY A ZELENÝ ELEKTRÓDOVÝ MATERIÁL PRE ELEKTROCHEMICKÉ SENZORY
Olha Sarakhman, Mária Purdeková, Michal Hatala, Pavol Gemeiner, Ľubomír Švorc 62

1P02 VOLTAMPÉROMETRICKÁ METÓDA PRE DETEKCIU OXIDU SIRIČITÉHO VO VÍNE ZALOŽENÁ NA ELEKTRÓDE Z DIAMANTU DOPOVANÉHO BÓROM A REAKČNEJ ELEKTROCHÉMII BEZ INTERFERENCIÍ
Eva Culková, Miroslav Rievaj, Peter Tomčík 62

1P03 STUDIUM VOLTAMETRICKÉHO CHOVÁNÍ 7B-HYDROXYCHOLESTEROLU NA ELEKTRODĚ Z BOREM DOPOVANÉHO DIAMANTU
Eva Bláhová, Lucie Serbanová, Karolina Schwarzová-Pecková 63

1P04 PERFORMANCE OF DIFFERENT BORON-DOPED DIAMOND SURFACE STATES IN ELECTROCHEMICAL DETECTION OF NEUROTRANSMITTERS IN NEURON CULTIVATION MEDIUM
Anton Lytvynenko, Simona Baluchová, Jan Krůšek, Karolina Schwarzová-Pecková 63

1P05 FLOW TECHNIQUES FOR SAMPLE PRETREATMENT
Petr Solich, Burkhard Horstkotte, Hana Sklenářová, Petr Chocholouš, Dalibor Šatínský 64

1P06 VSÁDOVÁ INJEKČNÍ ANALÝZA
Jiří Barek 64

1P07 VSÁDZKOVÁ INJEKČNÁ ANALÝZA AKO ÚČINNÝ ANALYTICKÝ PROSTRIEDOK VO FARMACEUTICKEJ PRAXI
Marek Haššo, Adela Kekeľáková, Gabriela Kováčiková, Ľubomír Švorc 65

1P08 KATECHOLÁZOVÁ AKTIVITA KOMPLEXŮ MĚDI: V ROZTOKU VS. NA POVRCHU ČÁSTIC
Michaela Bártová, Tomáš Mikysek 65

1P09 METHODS OF RAPID HEAVY METALS DETERMINATION IN WINE SAMPLES
Jarmila Švancarová Laštincová.....66

1P10 SYNTHESIS AND ANALYTICAL APPLICATIONS OF CdTe-QD'S NANOPARTICLES
Ivan Landry Yumdjo Youmbissi, Petra Humajová, Patrik Baliak, Alžběta Jebavá, Lenka Řezáčová, Přemysl Lubal 66

1P11 ADVANCED SELECTIVE MATERIALS AS ADSORBENTS FOR SAMPLE PREPARATION EXTRACTION TECHNIQUES AND HPLC ANALYSIS OF BIOACTIVE COMPOUNDS
Katarína Hroboňová, Andrea Špačková, Jana Sádecká.....67

1P12 DEVELOPMENT OF MOLECULARLY IMPRINTED POLYMER AND ITS MAGNETIC VERSION FOR THE EXTRACTION OF PANTHENOL FROM PERSONAL CARE PRODUCTS
Andrea Špačková, Katarína Hroboňová.....67

1P13 GLYCOPEPTIDE ENRICHMENT ON POLAR STATIONARY PHASES IN HYDROPHILIC INTERACTION LIQUID CHROMATOGRAPHY MODE
Katarína Molnárová, Petr Kozlík 68

1P14 STRUKTURA DNA NA ELEKTRODÁCH: MOŽNÁ ÚSKALÍ A CESTY K JEJICH PŘEKONÁNÍ
Miroslav Fojta, Hana Pivoňková, Luděk Havran, Daniel Dobrovodský, Monika Hermanová.....68

1P15 KOMPLEXY DNA OLIGONUKLEOTIDŮ A SLOŽEK DNA S IONTY RTUTI
Monika Hermanová, Marcela Hrušková, Luděk Havran, Miroslav Fojta.....69

1P16 VÝVOJ CITLIVÉHO A SELEKTÍVNEHO ELEKTROCHEMICKÉHO BIOSENZORA PRE DETEKCIU VIROIDOV (CBCVD)
Ondrej Hesko, Monika Hermanová, Alnilan Cristina Barros Lobato, Miroslav Fojta.....69

1P17 SWOT ANALÝZA ELIMINAČNÍ VOLTAMETRIE S LINEÁRNÍM SCANEM
Tomáš Navrátil, Jana Skopalová, Vojtěch Hrdlička, Xiaochun Li, Libuše Trnková 70

1P18 NETRADIČNÍ SPOJENÍ ELEKTROCHEMIE S HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIÍ: ANALÝZA ELEKTROLYTICKÝCH PRODUKTŮ ADSORBOVANÝCH NA ELEKTRODĚ
Jana Skopalová, Radek Jerga, Petra Krejčí, Petr Bednář, Petr Barták 70

1P19 IS BIOCHAR A RELIABLE SUBSTITUTE FOR CARBON BLACK IN ELECTROCHEMICAL SENSING?
Olha Sarakhman, Pavol Gemeiner, Michal Hatala, Vlastimil Vyskočil, Jiří Barek, Ján Labuda, Ľubomír Švorc 71

1P20 CHEMICKÝ OTISK JAKO NÁSTROJ PRO URČENÍ PROVENIENCE RADIOLARITOVÝCH ARTEFAKTŮ
Tomáš Pluháček, Martin Moník, Zdeňka Nerudová, Jitka Součková, Filip Gregar, Adéla Mikulová.....71

1P21 ELEKTROCHEMICKÁ OXIDÁCIA VYBRANÝCH PERZISTENTNÝCH ZLÚČENÍN A IDENTIFIKÁCIA ICH DEGRADAČNÝCH A TRANSFORMAČNÝCH PRODUKTOV
Lucia Hojová, Gabriela Kuchtová, Libor Dušek, Marian Marton, Marian Vojs, Andrea Vojs Staňová..72

1P22 VPLYV TRIKLOSANU A STRIEBORNÝCH NANOČASTÍC NA DNA/GCE BIOSENZOR
Jana Blaškovičová.....72

1P23 VALIDACE METODY PRO STANOVENÍ AMINOKYSELIN V PŮDÁCH
Sylvie Kříženecká, Veronika Hájková, Hana Burdová.....73

Prednášky - Sekcia 2: Fyzikálna chémia 74

2P01 ELEKTROCHEMICKÁ STUDIE VYBRANÝCH ACYLGERMANŮ
Vojtěch Bičák, Alan Liška, Jiří Ludvík, Michael Haas.....74

2P02 METODA SKUPINOVÝCH PŘÍSPĚVKŮ PRO KVALIFIKOVANÉ ODHADY PRVNÍCH REDOXNÍCH POTENCIÁLŮ
Alan Liška, Vojtěch Bičák, Jiří Ludvík.....74

2P03 EPR AND UV–VIS–NIR SPECTROELECTROCHEMISTRY OF BIOLOGICALLY ACTIVE COPPER COMPLEXES
Peter Rapta.....75

2P04 USAGE OF DOPPED SAPPHIRES AS MULTIMODAL MARKERS FOR IN-VIVO IMAGING
Martin Šácha.....75

2P05 RELATIONSHIP BETWEEN PHOTOCATALYTIC DEGRADATION OF ORGANIC DYES AND PHOTOCATALYTIC WATER SPLITTING IN OXIDE AND SULFIDE SEMICONDUCTORS
Michal Žitňan, Surjyakanta Rana, Muhammad Iqbal, Vicente D. Rodríguez, Dušan Galusek, Pedro Núñez, José J. Velázquez.....76

2P06 COMPUTATIONAL STUDY OF MODIFIED GRAPHENE-BASED NANOMATERIALS
Michal Malček, Simona Müllerová, Lukáš Bučinský, M. Natália D. S. Cordeiro.....76

Prednášky - sekcia 3: Anorganická a materiálová chémia..... 77

3P01 NEUTRAL COBALT(II)-BIS(BENZIMIDAZOLE)PYRIDINE FIELD-INDUCED SINGLE-ION MAGNETS
Jana Juráková,Ivan Nemec, Radovan Herchel, Denis Gentili,Massimiliano Cavallini,Ivan Šalitroš 77

3P02 LIGHT-INDUCED ISOMERIZATION OF AZOPHENYL MOIETY IN SCO ACTIVE FE(II) COMPLEXES
Alexandra Šagátová, Jakub Orvoš, Ivan Šalitroš 77

3P03 MANGANATÉ KOORDINAČNÍ SLOUČENINY S MAKROCYKLYCKÝMI LIGANDY POHLEDEM KVANTOVÉ CHEMIE
Marie Pražáková, Bohuslav Drahoš, Radovan Herchel 78

3P04 COBALT(II) COMPLEXES WITH BIS(PYRAZOLYL)PYRIDINE LIGANDS ACTING AS FIELD-INDUCED SINGLE-ION MAGNETS
Jana Juráková, Ivan Nemec, Radovan Herchel, Vinicius Tadeu Santana, Ivan Šalitroš.....79

3P05 NUKLEÁZOVÁ AKTIVITA KOORDINAČNÝCH ZLÚČENÍN ZALOŽENÝCH NA DERIVÁTOCH TRIAZACYKLONONÁNU
Michaela Buziková, Jan Kotek 79

3P06 NEW MIXED CATION HEPTAFLUOROZIRCONATES/HAFNATES
Oksana Matselko, Morgane Poupon, Erika Samolova, Zuzana Vaskova, Blanka Kubíková, Zuzana Netriová, Matej Mičušík, Miroslav Boča.....80

3P07 GEOMETRICKÝ INDEX PRE HEXAKOORDINOVANÉ ZLÚČENINY
Ján Moncoľ 81

3P08 $In_2S_3/Bi_2WO_6/Fe_3O_4$ MAGNETIC CORE-SHELL STUCTURE AS AN EFFICIENT CATALYST FOR SONO-PHOTO HYBRID CATALYTIC DEGRADATION OF TETRACYCLINE
Mir Saeed Sajjadi, Robert Klement 81

3P09 PHOTOINDUCED MODIFICATION OF THE GE-AS-S GLASS SURFACE
Ekaterina Samsonova, Petr Kutálek, Eva Černošková, Petr Knotek, Jiří Schwarz.....81

3P10 PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE TENKÝCH VRSTEV CHALKOGENIDOVÝCH SKEL SYSTÉMŮ As-Se A As-S-Se Z MODIFIKOVANÉHO ROZTOKU SKLA $As_{50}Se_{50}$
Jiří Jemelka, Karel Pálka, Jiří Jančálek, Michal Kurka, Stanislav Šlang, Miroslav Vlček.....82

3P11 MOF-UHLÍKATÉ KOMPOZITY PRO SORPCI OXIDU UHLIČITÉHO
Tomáš Zelenka, Aleš Badač,Madhav Chavhan, Miroslav Almáši 83

Prednášky - sekcia 4: Organická chémia 83

4P01 MODIFIKOVANÉ NUKLEOFILY REAKTIVUJÍCÍ CHOLINESTERASY INHIBOVANÉ ORGANOFOSFOROVÝMI SLOUČENINAMI: SYNTÉZA A BIOLOGICKÁ AKTIVITA
Dávid Maliňák, Kamil Musílek, Tamara Zorbaz, Zuzana Kohoutová, Rudolf Andrýs, Karolína Knittelová, Adam Skarka, Monika Schmidt, Zrinka Kovarik 83

4P02 DIGLYKOZIDÁZY AKO NÁSTROJ SYNTÉZY ŠTRUKTÚROVANÝCH DIGLYKOZIDOV
Peter Haluz, Matej Cvečko, Elena Karnišová Potocká, Peter Kis, Mária Mastihubová, Vladimír Mastihuba 84

4P03 TOTAL SYNTHESIS OF HEMEROCALLISAMINE I PAVED BY GRAM-SCALE SYNTHESIS OF (2*S*,4*S*)-4-HYDROXYGLUTAMIC ACID LACTONE
Lucia Pinčeková, Eva Jančiová, Dušan Berkeš, Róbert Gyepes, Andrej Kolarovič, Oľga Caletková 84

4P04 SAR STUDIES OF NOVEL MACROCYCLIC ANTIBIOTIC BERKELEYLACTONE A
Dominika Valachová, Tomáš Malatinský, Pavol Jakubec, Oľga Caletková, Dušan Berkeš 85

4P05 PRÍPRAVA A VYUŽITIE OLIGONUKLEOTIDOV S TERMINÁLNOU DIFOSFÁTOVOU SKUPINOU
Ján Matyašovský, Pavol Čekan 86

4P06 ESCHENMOSEROVA REAKCE PRIMÁRNÍCH THIOAMIDŮ – KDY FUNGUJE A KDY NIKOLIV
Jiří Hanusek, Lukáš Marek, Jiří Váňa, Jan Svoboda 86

4P07 TANDEM ARYLATION OF BINAPHTHYL BY SUZUKI COUPLING AND C–H ACTIVATION
Martin Putala, Filip Bulko 87

4P08 CATALYTIC ENANTIOSELECTIVE NUCLEOPHILIC DESYMMETRISATION AT P(V)
Branislav Ferko, Darren J Dixon 87

4P09 1,3,5-TRIAZÍNY A ICH SYNTETICKO-BIOLOGICKÝ POTENCIÁL
Viktor Milata, Branislav Pavílek, Dušan Bortňák, Daniel Végh 88

4P10 TRANSFORMATIONS OF THE SYNTHETIC CHAMELEON
Pavol Jakubec 88

4P11 ^{15}N NMR STUDIE AZO-HYDRAZO TAUTOMERIE V PRŮMYSLOVĚ VYRÁBĚNÝCH AZOBARVIVECH
Antonín Lyčka 89

4P12 STEREOSELECTIVE SYNTHESIS OF INDOLIZIDINE ALKALOIDS FROM L-GLUTAMIC ACID
Paula Fraňová, Štefan Marchalín, Peter Šafář 89

4P13 SUFLONES AND SULFOXIDES - THE KEY TO IMPROVED PROPERTIES OF TETRAZINES FOR BIOORTHOGONAL APPLICATIONS
Michal Májek, Margarita Valentine, Matej Trtúšek 90

4P14 SHED LIGHT ON TRIARYLHYDRAZONE PHOTOSWITCHES
Marek Cigáň, Anna M. Grabarz,Lea Hegedüsová, Lukáš F. Pašteka, Šimon Budzák, Miroslav Medveď, Juraj Filo, Bernard Mravec, Chavdar Slavov, Josef Wachtveitl, Nadine Blaise 90

4P15 INSIGHTS INTO THE PHOTOSWITCHING BEHAVIOUR OF UNSYMMETRICAL BENZOTHIAZOLE-BASED DITHIENYLETHENES
Juraj Filo, Marek Cigáň, Šimon Budzák, Ivica Sigmundová, Peter Magdolen, Eliška Procházková, Michelangelo Bovoloni, Matteo Tommasini, Andrea Bianco 91

4P16 SYNTÉZA A STUDIUM NOVÝCH PŘEPÍNAČŮ NA BÁZI HYDRAZONŮ A JEJICH MODIFIKACE STABILNÍM RADIKÁLEM
Lucie Kotásková, Ivan Nemec, Pawel Jewula, Vinicius Santana, Petr Neugebauer 92

Prednášky - sekcia 5 Vyučovanie a história chémie..... 92

5P01 VYDAVATEĽSKÁ ČINNOSŤ SLOVENSKEJ CHEMICKEJ SPOLOČNOSTI OD ROKU 1942 DO ROKU 2023
Viktor Milata, Michal Uher.....92

5P02 CHEMIE A DALŠÍ PŘÍRODNÍ VĚDY NA SLEZSKOOSTRAVSKÉM HRADĚ – 17 LET POPULARIZACE V OSTRAVĚ
Martin Mucha.....93

5P03 ANALÝZA FAKTOROV ÚSPECHU V CHEMICKÝCH VÝPOČTOCH: PRÍČINY A DÔVODY VÝSLEDKOV ŠTUDENTOV 1. ROČNÍKA VŠ
Martin Rusek, Veronika Machková, Dominika Koperová, Iveta Bártová, Vladimír Sirotek, Petr Šmejkal, Jitka Štrofová 94

5P04 CHEMICKÉ VZDELÁVANIE V KONTEXTE KURIKULÁRNEJ REFORMY
Katarína Kotuľáková.....94

5P05 EXPEDÍCIA: VČERA ALTERNATÍVNE, ZAJTRA BEŽNÉ UČEBNICE CHÉMIE
Ľubomír Held.....94

Prednášky - sekcia 6 Aplikovaná chémia, životné prostredie a polyméry 95

6P01 VYUŽITIE FERMENTÁCIE JABLKOVÝCH VÝLISKOV NA ZVÝŠENIE OBSAHU POLYFENOLOV
František Kreps, Mária Greifová, Mária Jedináková, Zuzana Krepsová 95

6P02 VYUŽITIE RAKYTNÍKOVEJ ŠŤAVY NA PRÍPRAVU FERMENTOVANÝCH OVOCNÝCH NÁPOJOV
Zuzana Krepsová, Mária Greifová, Svetlana Schubertová, František Kreps 96

6P03 VYUŽITÍ MONOMERŮ Z ROSTLINNÝCH OLEJŮ V SYNTÉZE AKRYLÁTOVÝCH LATEXŮ PRO LAKAŘSKÉ APLIKACE
Martin Kolář, Jana Machotová, Štěpán Podzimek, Jan Honzíček, Martin Hájek 96

6P04 TIŠTĚNÉ INDIKÁTORY PRO CHYTRÉ POTRAVINOVÉ OBALY
Vojtěch Dobiáš, Denisa Filipi, Mária Veselá, Michal Veselý.....97

6P05 POLYMERNÍ VEKTORY NA BÁZI DIBLOKOVÝCH HYDROLYTICKY ŠTĚPITELNÝCH POLYKATIONTŮ PRO DORUČOVÁNÍ GENŮ
Eliška Hrdá, Richard Laga, Ladislav Androvič 97

6P06 STARNUTIE A MOŽNOSTI OCHRANY POLYURETÁNOVÝCH MATERIÁLOV V ZBIERKACH KULTÚRNEHO DEDIČSTVA
Radko Tiňo, Lenka Lopatková, Katarína Vizárová, Simona Klempová, Soňa Malečková 98

6P07 APLIKACE POKROČILÝCH OXIDAČNÍCH PROCESŮ DO TECHNOLOGIE ÚPRAVY A ČIŠTĚNÍ PROCESNÍCH VOD V MODULÁRNÍ ČISTÍRNĚ
Libor Dušek 98

6P08 MODIFIKOVANÉ POLYMERY: NÁPLNĚ KOLON PRO SELEKTIVNÍ SORPCE A REAKCE V PRŮTOČNÉM USPOŘÁDÁNÍ
Martin Kocúrik, Jaroslav Pochobradský, Jan Bartáček, Miloš Sedlák, Jan Svoboda.....99

6P09 VYBRANÉ KOMPLEXY PŘECHODNÝCH KOVŮ VYUŽITELNÉ JAKO KATALYZÁTORY PRO VYTVRZOVÁNÍ NENASYCENÝCH POLYESTEROVÝCH PRYSKYŘIC
Eliška Matušková, Jan Honzíček, David Rubeš, Jan Vinklárek.....99

6P10 TRIETHYLAMINE AS A HIGHLY EFFICIENT CATALYST FOR THE CHEMICAL IMIDIZATION OF POLYIMIDES
Zuzana Frances Šimonová, Jana Machotová, Pavel Šimon, Jiří Zelenka 100

6P11 VLIV TYPU A MODIFIKACÍ POLYSACHARIDOVÝCH NANOKRYSTALŮ NA STRUKTURU A VLASTNOSTI NANOKOMPOZITU S MATRICÍ PCL/PLA
Ivan Kelnar, A. M. Abdel-Mohsen 100

Prednášky - sekcia 7 Chemprogress – chemické technológie ... 101

7P01 VLIV PŘEDÚPRAVY MEMBRÁNY A VODIVOSTI KATALYZÁTORU NA VÝKON ALKALICKÉ ELEKTROLÝZY VODY S ANIONTOVĚ SELEKTIVNÍ MEMBRÁNOU
Michaela Plevová, Jaromír Hnát, Jan Žitka, Karel Bouzek 101

7P02 POLYBENZIMIDAZOLE BASED SEPARATOR FOR ALKALINE MEMBRANE WATER ELECTROLYSIS
Kateřina Hradečná, Jaromír Hnát, Karel Bouzek 101

7P03 VLIV TYPU SEPARÁTORU NA PROVOZ ALKALICKÉHO ELEKTROLYZÉRU VODY PŘI NÍZKÝCH KONCENTRACÍCH KAPALNÉHO ELEKTROLYTU
Karel Denk, Roman Kodým, Jaromír Hnát, Martin Paidar, Karel Bouzek 102

7P04 VIACZLOŽKOVÉ Ni-Fe-W KATALYZÁTORY PRE ZERO-GAP ALKALICKÚ ELEKTROLÝZU VODY
Jana Záchenská, Matilda Zemanová 102

7P05 BIFUNČKNÍ KATALYZÁTORY NA BÁZI SELENIDŮ PŘECHODNÝCH KOVŮ PRO POUŽITÍ V REVERZIBILNÍCH ALKALICKÝCH PALIVOVÝCH ČLÁNCÍCH
Dita Hronová, Jaromír Hnát, Karel Bouzek 103

7P06 STUDIUM DYNAMIKY ZMĚN EXPANZNÍCH SIL A ROZMĚRŮ PILOTNÍHO ELEKTRODIALÝZNÍHO SVAZKU
Roman Kodým, David Tichý, Michal Němeček, Dalimil Šnita, Karel Bouzek 103

7P07 NOVÉ SLITINOVÉ KATYLYZÁTORY PRO POUŽITÍ VE VYSOKOTEPLOTNÍCH PALIVOVÝCH ČLÁNCÍCH S PROTONOVĚ VODIVOU MEMBRÁNOU
Jan Dismas Buriánek, Martin Prokop, Tomas Bystron, Matija Gatalo, Luka Pavko, Nejc Hodnik, Karel Bouzek 104

7P08 KORÓZIA KOVOV V KONTAKTE S MATERIÁLMI POUŽÍVANÝMI PRE SKLADOVANIE LATENTNÉHO TEPLA
Andrea Červenková, Vladimír Danielik 104

7P09 ELEKTROCHEMICKÉ METÓDY NA CHARAKTERIZÁCIU MODIFIKOVANÝCH TANÁTOVÝCH VRSTIEV ŽELEZNÝCH ARTEFAKTOV
Roman Košťúr, Matilda Zemanová 105

7P10 SLEDOVANIE STABILITY ŽELEZANOV
Michaela Benköová, Emília Mališová, Ján Híveš 105

7P11 RIEŠENIE PROBLÉMU ENVIRO-ZÁŤAŽE V STRÁŽSKOM
Ján Híveš, Ladislav Štibrányi, Jaroslava Maroszová, Michaela Benkoöová 106

7P12 POLYCHLÓROVANÉ BIFENYLY STRÁŽSKE - MINULOSŤ A SÚČASNOSŤ
Ladislav Štibrányi, Viktor Milata, Ján Híveš 106

Cena Marty Sališovej 108

CMS01 DEVELOPMENT OF AN ANALYTICAL METHOD FOR MONITORING SELECTED BIOPLASTICIZERS IN WATER
Nicolette Viktoryová, Agneša Szarka, Francisco Javier Arrebola Liébanas 108

CMS02 KATALYTICKÁ HYDROGENACE CO_2 NA KATALYZÁTORECH TYPU OXIDŮ KOBALTU
Zuzana Kovářová, Libor Kvítek 108

CMS03 ANALÝZA MASTNÝCH KYSELÍN S KRÁTKYM A STREDNE DLHÝM UHLÍKOVÝM REŤAZCOM V SYROCH POMOCOU GC-MS
Michal Fulín, Richard Gruchaľák, Jaroslav Blaško, Ľubomíra Duhačková, Janka Kubincová, Marek Kunštek 109

CMS04 POMALÁ MAGNETICKÁ RELAXÁCIA V JEDNOJADROVÝCH MN(II) KOMPLEXOCH
Romana Mičová, Cyril Rajnák, Ján Titiš, Erika Samoľová, Michal Zalibera, Alina Bieńko, Roman Boča 109

CMS05 ŠTÚDIUM MIKROŠTRUKTÚRY VZORIEK NA BÁZE DIMETAKRYLÁTU A VPLYV VARIABILNÝCH PARAMETROV NA ICH VLASTNOSTI
Katarína Cifraničová, Ondrej Šauša, Dávid Pavel Královič, Helena Švajdlenková 110

CMS06 ANALÝZA GLYKÁNOV AKO DIAGNOSTICKÝ NÁSTROJ RAKOVINOVÝCH OCHORENÍ
Andrea Pinkeová, Adela Tomíková, Anikó Bertóková, Tomáš Bertók, Ján Tkáč 111

CMS07 ELEKTROCHEMICKÉ VLASTNOSTI MONOKRYSTALICKÝCH BOREM DOPOVANÝCH DIAMANTOVÝCH ELEKTROD S RŮZNÝMI KRYSTALOVÝMI ORIENTACEMI A JEJICH APLIKACE V ELEKTROANALÝZE
Peter Čambal, Simona Baluchová, Jana Poláková, Andrew Taylor, Karolina Schwarzová-Pecková 111

CMS08 STUDIUM ELEKTROCHEMICKÉHO CHOVÁNÍ PRIMÁRNÍCH A SEKUNDÁRNÍCH ŽLUČOVÝCH KYSELIN A JEJICH KONJUGÁTŮ
Kristýna Jelšíková, Eva Bláhová, Jana Kubešová, Jana Skopalová, Karolina Schwarzová-Pecková 112

CMS09 POLYKRYSTALICKÉ BOREM DOPOVANÉ DIAMANTOVÉ ELEKTRODY S KONTROLOVANÝM OBSAHEM SP^2 UHLÍKU: SPEKTRÁLNÍ A ELEKTROCHEMICKÁ CHARAKTERIZACE
Michal Zelenský, Jan Hrabovsky, Jan Fischer, Andrew Taylor, Karolina Schwarzová-Pecková 113

CMS10 NANOČÁSTICE UŠLECHTILÝCH KOVŮ V PROTINÁDOROVÉ FOTOTERMÁLNÍ TERAPII
Lucie Válková, Lucie Hochvaldová, Markéta Kolaříková, Aleš Panáček, Hana Kolářová 113

CMS11 ELEKTROCHEMICKÁ DETEKCIA DNA G-KVADRUPLEXOV POMOCOU N-METYL MESOPORFYRÍNU AKO REDOXNEJ SONDY
Daniel Dobrovodský, Aleš Daňhel, Daniel Renčiuk, Miroslav Fojta 114

CMS12 TETRAKOORDINOVANÉ CO(II) KOMPLEXY ZOSTAVENÉ Z HETEROCYKLICKÝCH AROMATICKÝCH LIGANDOV
Zuzana Bielková, Cyril Rajnák, Ján Titiš, Ján Moncoľ, Alena Klokočíková, Roman Boča 115

CMS13 FENOMÉN TEPLOTNE INDUKOVANÉHO JAVU OBRÁTENIA SPINU V KOMPLEXE ŽELEZA(III)
Terézia Laluhová, Ján Titiš, Erika Samoľová, Kevin Tran, Franz Renz, Michal Malina, Roman Boča, Cyril Rajnák 115

Postery - sekcia 1 Analytická chémia 116

1Po01 ANALÝZA BIOGENNÍCH AMINŮ V PIVECH METODOU MEPS-HPLC/UV
Martin Adam, Eliška Trnková, Aleš Eisner 116

1Po02 WHITE AND BLACK ANODIC TiO_2 NANOTUBES: COMPARISON OF BIOLOGICAL EFFECTS IN NEURAL SH-SY5Y CELLS
Jana Bacova, Hanna Sopha, Jan Capek, Tomas Rousar, Jan M. Macak 116

1Po03 MINIATURIZOVANÝ AMPEROMETRICKÝ DETEKTOR S KOVOVOU REFERENČNÍ ELEKTRODOU
Martin Baroch, Hana Dejmková 117

1Po04 MULTIPRVKOVÁ ANALÝZA POMOCOU AAS SPEKTROMETRA
František Čacho, Jakub Masác 117

1Po05 VOLTAMETRICKÉ CHOVÁNÍ FERROCENOVÝCH GLYKOMIMETIK A STUDIUM JEJICH INTERAKCE S GALEKTINEM-1 POMOCÍ ELEKTRODY Z PYROLYTICKÉHO GRAFITU
Lucie Žaloudková, Vojtěch Hamala, Veronika Ostatná, Jindřich Karban, Aleš Daňhel 118

1Po06 STANOVENÍ PESTICIDŮ VE VODÁCH V REŽIMU MRM
Aleš Eisner, Martin Adam 118

1Po07 ZLEPŠENIE PRIESTOROVÉHO ROZLÍŠENIA LIBS URČOVANÍM ROZMEROV ABLAČNÝCH KRÁTEROV
Daniel Haško 119

1Po08 STANOVENÍ HMOTNOSTNÍ AKTIVITY VYBRANÝCH PŘÍRODNÍCH RADIONUKLIDŮ V POTRAVINÁCH
Alena Kelnarová, Eva Schlesingerová, Helena Pilátová 119

1Po09 STUDIUM POROZITY UHLÍKATÝCH MATERIÁLŮ POMOCÍ LOW-FIELD NMR RELAXOMETRIE
Patrik Kopčan, Eva Kinnertová 119

1Po10 VYUŽITÍ ADSORPCE NA MAGNETICKÝCH MATERIÁLECH PŘI PŘÍPRAVĚ VZORKŮ PŘÍRODNÍCH VOD KE STANOVENÍ STOPOVÝCH MNOŽSTVÍ IONTŮ TĚŽKÝCH KOVŮ
Kateřina Krtková, Martin Mucha 120

1Po11 MICROARRAY BIOSENSING IN GLYCOMICS ADOPTING 4D APPROACH
Paras H. Kundalia, Lucia Pažitná, Kristína Kianičková, Eduard Jáné, Lenka Lorencová, Jaroslav Katrlík 120

1Po12 FORENZNÁ APLIKÁCIA CHROMATOGRAFICKÉHO STANOVENIA BENZODIAZEPÍNOV
Alica Várfalvyová, Barbora Benická, Elena Kupcová 121

1Po13 SELENIUM APPARENTLY HELPS AGAINST CORONAVIRUSES
Alena Manová, Kristína Vodičková, Miroslav Rusko 121

1Po14 LA-ICP-MS IN MEDICAL RESEARCH
Martina Machalová, Michaela Vašinová Galiová, Tibor Stračina 122

1Po15 ANALYTICKÁ CHARAKTERIZÁCIA NANOMATERÁLOV VO VZORKÁCH SO ZLOŽITOU MATRICOU
Ján Labuda, Veronika Svitková 122

1Po16 STANOVENÍ KATECHOLAMINŮ A METANEFRINŮ Z TĚLNÍCH TEKUTIN V DIAGNOSTICE FEOCHROMOCYTOMU A PARAGANGLIOMU
Alice Markvartová, Jiří Widimský jr., Tomáš Zelinka, Jan Škrha sr., Michal Vrablík 123

1Po17 STANOVENIE JODIDOV VO VZORKÁCH VÔD S VYSOKÝM OBSAHOM CHLORIDOV
Jakub Masác, František Čacho 123

1Po18 ELECTROCHEMICAL IMPEDANCE SPECTROSCOPY FOR THE QUANTITATIVE DETERMINATION OF DRUGS
Oleksandr Matvieiev, Renáta Šelešovská, Marian Vojs, Pavlína Kelíšková, Lenka Janíková, Jaromíra Chýlková 124

1Po19 ROZKLAD PEVNÝCH VZORKŮ POMOCÍ AUTOMATICKÉ TAVIČKY KATANAX
Ondřej Pařízek 124

1Po20 VPLYV ROZPÚŠŤADIEL A ICH ELIMINÁCIA V KVAPALINOVEJ CHROMATOGRAFII V SPOJENÍ S INFRAČERVENOU SPEKTROMETRIOU NA IDENTIFIKÁCIU LÁTOK
Denis Pavelek, Radoslav Halko 125

1Po21 NOVÝ PŘÍSTUP K OXIDACI LÉČIV
Lucie Pražáková, Jan Fischer, Anna Kubíčková 125

1Po22 RAPID DETERMINATION OF ^{226}Ra USING A MODIFIED SORBENT
Veronika Silliková, Jana Jakubčinová, Silvia Dulanská 126

1Po23 ELEKTROCHEMICKÁ DETEKCE INTERAKCE GALEKTÍNU A JEHO GLYKOMIMETIK
Marek Zelinka, Peter Šebest, Veronika Ostatná, Aleš Daňhel 126

1Po24 RÁDIOFARMAKA S OBSAHOM JÓDU – VYUŽITIE RÁDIOANALYTICKÝCH METÓD PRI ICH KONTROLE KVALITY
Darina Tóthová, Tomáš Cincula, Michal Galamboš 127

1Po25 ÚPRAVA VZORKY SMOLKY PRE ĽUDSKÝ BIOMONITORING METABOLITOV PLASTIFIKÁTORA DINCH
Lucia Vráblová, Renáta Górová, Helena Jurdáková 127

1Po26 ALDO-KETO REDUCTASE 1C3 AS A NOVEL OFF-TARGET FOR THE BRUTON′S TYROSINE KINASE INHIBITOR TIRABRUTINIB
Eva Novotná, Lucie Čermáková, Lenka Laštovičková, Vladimír Wsól 128

1Po27 2D MXENE COMPOSITES BASED INTERFACES FOR ULTRASENSITIVE CANCER BIOMARKERS NANOBIOSENSING
Lenka Lorencová, Veronika Pinková Gajdošová, Štefánia Hrončeková, Juvissan Aguedo, Tomáš Bertók, Peter Kasák, Ján Tkáč 128

Postery - sekcia 2 Fyzikálna chémia 130

2Po01 POVRCHOVÉ AKTIVITY PRÍRODNÝCH DERIVÁTOV KYSELINY OLEÁNOVEJ
Martin Bajcura, Miloš Lukáč, Martin Pisárčik 130

2Po02 DSC STUDY OF THERMOOXIDATIVE STABILITY OF LIGNOSULFONATE-FILLED RUBBER COMPOUNDS
Zuzana Cibulková, Tibor Dubaj, Peter Šimon 130

2Po03 NANODIAMONDS WITH THERMORESPONSIVE POLYMERS FOR INTRACELLULAR THERMOMETRY
Jakub Copak, Michal Gulka, Ema Fialova, Maabur Sow, Raúl B. Gonzalez, Simon Lepleux, Fedor Jelezko, Petr Cigler 131

2Po04 CONFORMATIONAL ANALYSIS OF THE TAU SEQUENCE 214SER-THR231 BY COMBINED MM AND QM METHODS
Michal Hricovíni, Ondrej Cehlár, Rostislav Škrabana, Miloš Hricovíni 131

2Po05 REZONANČNE ZOSILNENÉ THz-FWM VO FLUORIDOCH
Eva Noskovičová, Monika Jerigová, Vojtech Szocs, Dušan Velič, Katarína Koťuhová, Dušan Lorenc 132

2Po06 VOLUME PROPERTIES OF THE MOLTEN SYSTEMS MF ─ K_2ZRF_6 (MF = LiF; NaF AND KF)
Jarmila Mlynáriková, Miroslav Boča, Blanka Kubíková 132

2Po07 3D TLAČENÝ THZ FOTONICKÝ PRIETOKOVÝ SENZOR PRE DETEKCIU NEBEZPEČNÝCH PLYNOV
Eva Noskovičová, Monika Jerigová, Vojtech Szöcs, Dušan Velič, Justína Nováková, Simon Fleming, Alessandro Tuniz, Dušan Lorenc 132

2Po08 STANOVENIE ÚČINNÉHO PRIEREZU DVOJFOTÓNOVEJ ABSORPCIE METÓDOU Z-SCAN
Dominik Sarvaš, Eva Noskovičová, Dušan Lorenc 132

2Po09 KINETIC COMPENSATION EFFECT IN SIMPLE AND COMPLEX PROCESSES
Peter Šimon, Tibor Dubaj, Zuzana Cibulková 133

2Po10 EFFECT OF Cu(II) ON THE BIOCHEMICAL PROPERTIES OF SELECTED POLYPHENOLS: THEORY vs. EXPERIMENT
Miriama Šimunková, Marek Štekláč, Michal Malček, Martin Kemény, Renáta Raptová, Marián Valko 133

2Po11 EXPLORING A4B1 INTEGRIN-POLYPEPTIDIC LIGAND INTERACTIONS THROUGH IN SILICO METHODS
Stanislav Kozmon, Barbora Stratilová 134

2Po12 TRIEDENIE HMOTNOSTNÝCH SPEKTIER UHLÍKATÝCH CHONDRITOV PODĽA STUPŇA PREMENY POMOCOU PCA
Justína Nováková, Vojtech Szöcs, Dušan Lorenc, Monika Jerigová, Martin Baláž 134

Postery - sekcia 3 Anorganická a materiálová chémia..... 135

3Po01 PŘÍPRAVA A VYUŽITÍ KOMPOZITNÍCH SORBENTŮ Z ELEKTRÁRENSKÝCH POPÍLKŮ K ČIŠTĚNÍ ODPADNÍCH VOD
Barbora Doušová, Eva Bedrnová, Miloslav Lhotka, Lukáš Pilař, David Koloušek.....135

3Po02 SURFACE OPTIMIZATION OF NANODIAMONDS USING NON-THERMAL PLASMA
Michal Gulka, Priyadharshini Balasubramanian, Ekaterina Shagieva, Josef Khun, Vladimir Scholtz, Fedor Jelezko, Stepan Stehlik, Petr Cigler 135

3Po03 VPLYV TEPLOTY SPEKANIA NA PEVNOSŤ V OHYBE HYDROXYAPATITOVEJ KERAMIKY PRIPRAVENEJ 3D TLAČOU
Zora Hajdúchová, Sára Jurašková, Marián Janek 136

3Po04 CHANGES OF CLASS G CEMENT PASTE INDUCED BY THE COMBINED EFFECT OF GEOTHERMAL WATER AND HIGH TEMPERATURE
Eva Kuzielová, Zora Hajdúchová, Matúš Žemlička, Jiří Másilko, Oľga Fričová 136

3Po05 COMPARISON OF GEOTHERMAL WATER AND SODIUM CHLORIDE SOLUTION ACTION ON CEMENT PASTES UNDER AMBIENT CONDITIONS
Eva Kuzielová, Zora Hajdúchová, Kristína Compeľová, Michal Slaný, Vladimír Pavlík 137

3Po06 KOMPLEXY Zr(IV) S DERIVÁTMI 8-HYDROXYCHINOLÍNU A ICH CYTOSTATICKÁ AKTIVITA
Michaela Harmošová, Mária Vilková, Martin Kello, Dominika Šebová, Erika Samoľová, Miroslava Litecká, Ivan Potočňák.....138

3Po07 ZKOUMÁNÍ ADAPTACE BAKTERIÍ NA ANTIMIKROBIÁLNÍ ÚČINKY NANOČÁSTIC STŘÍBRA
Lucie Hochvaldova, Renáta Večeřová, Milan Kolář, Libor Kvítek, Aleš Panáček 138

3Po08 BIOLOGICKY AKTÍVNE PALÁDNATÉ KOMPLEXY ZLOŽENIA $NH_2(CH_3)_2[PdCl_2(XQ)]$
Martina Kepeňová, Michaela Benediková, Miroslava Litecká, Ivan Potočňák 139

3Po09 VLIV RYCHLOSTI OHŘEVU PŘI PYROLÝZE NA MEZOPOROZITU SOFT-TEMPLÁTOVANÝCH GELŮ
Eva Kinnertová, Gabriela Zelenková, Lucie Kořená, Tomáš Zelenka, Václav Slovák.....139

3Po10 PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE NANOSTRUKTUROVANÝCH POVRCHŮ ROUBOVANÝCH ČÁSTICEMI PRO ANTIBAKTERIÁLNÍ VLASTNOSTI
Zdeňka Kolská, Simona Kamínková, Václav Švorčík 140

3Po11 VYUŽITÍ MIKROVLNNÉHO ZÁŘENÍ PŘI PŘÍPRAVĚ UHLÍKATÝCH XEROGELŮ
Lucie Kořená, Václav Slovák, Ana Arenillas, Samantha Lizette Flores López.....140

3Po12 VLIV RYCHLOSTI PRŮTOKU ATMOSFÉRY PŘI PYROLÝZE ORGANICKÝCH LÁTEK NA POROZITU VZNIKAJÍCÍCH UHLÍKATÝCH MATERIÁLŮ
Samuel Kowalczyk, Václav Slovák 141

3Po13 THE PHASE EQUILIBRIA OF Na_3AlF_6–NdF_3 AND $(Na_3AlF_6–NdF_3)_{EUT}$–Nd_2O_3 SYSTEM
Dhiya Krishnan, Michal Korenko, František Šimko, Blanka Kubíková 141

3Po14 MEĎNATÉ KOMPLEXY DERIVÁTOV KUMARÍNU AKO POTENCIONÁLNE PROTIRAKOVINOVÉ ČINIDLÁ
Jakub Kurjan, Mária Vilková, Miroslava Litecká, Ivan Potočňák 142

3Po15 NEAR-INFRARED PHOTOLUMINESCENT GOLD NANOCLUSTERS
Klaudia Kvaková, Goutam Pramanik, Ondřej Pavelka, Jan Valenta, Petr Cígler 142

3Po16 URČENÍ TEXTURNÍCH CHARAKTERISTIK JÍLOVÝCH MINERÁLŮ
Miloslav Lhotka, Barbora Doušova 143

3Po17 STABILIZED GOLD NANOPARTICLES BY POLYDIACETYLENES
Lenka Loukotová, Olha Lytvynenko, Jiří Schimer, Petr Cígler.....143

3Po18 CESIUM FLUORO–, OXO– AND OXO–FLUORO–ALUMINATES: SYNTHESIS, AND THEIR STABILITY
František Šimko, Zuzana Netriová, Aydar Rakhmatullin, Michal Korenko 144

3Po19 PLASMONIC SILVER NANOLAYERS-MODIFIED SURFACES FOR MICROTHERMAL-INDUCED SUBCELLULAR-TARGETED PROTEIN DAMAGE IN CELLS
Ales Panacek, Lucie Hochvaldova, Martin Mistrik, Zdenek Skrott.....144

3Po20 CONTROLLING ULTRASMALL GOLD NANOPARTICLES: IMPORTANCE OF SIZE AND STRUCTURE FOR THE STUDY OF CATALYTIC ACTIVITY
Radka Pocklanová, Jan Stehlík, Aneta Bužková, Aleš Panáček, Robert Prucek, Libor Kvítek.....145

3Po21 DESIGN AND SYNTHESIS OF POLYDENTATE PYCLEN-BASED LIGAND SUITABLE FOR COMPLEXATION OF MANGANESE(II) AND OTHER (BIOLOGICALLY) RELEVANT METAL IONS
Marie Pražáková, Bohuslav Drahoš.....145

3Po22 PŘÍPRAVA NANOKOMPOZITU OXIDU ŽELEZA A NANOČÁSTIC KOBALTU PRO APLIKACI DEGRADACE ETHINYLESTRADIOLU
Robert Prucek, Karolína Zrníková, Aneta Bužková.....146

3Po23 VLIV MORFOLOGIE POLYMERU NA UKOTVENÍ STŘÍBRNÝCH NANOČÁSTIC METODOU LIFT
Jakub Siegel, Jana Pryjmaková, Daniel Grossberger 146

3Po24 REPLIKACE BIOPOLYMERU PLLA A JEHO ANTIBAKTERIÁLNÍ VLASTNOSTI
Petr Slepička, Dominik Fajstavr, Nikola Slepičková Kasálková, Bára Frýdlová.....147

3Po25 PŘÍPRAVA Au A Cu NANOSTRUKTUR NA PERIODICKY VZOROVANÉM PEN PRO BIOAPLIKACE
Nikola Slepičková Kasálková, Jakub Siegel, Jana Pryjmaková, Petr Slepička.....147

3Po26 Bi_2O_2Se THERMOELECTRIC PROPERTIES COMPARISON STUDY
Antonín Sojka, Jan Zich, Jiří Navrátil, Ludvík Beneš, Tomáš Plecháček, Čestmír Drašar.....148

3Po27 SONOCHEMICKÁ PŘÍPRAVA VRSTEV NANO A SUBMIKRONOVÝCH ČÁSTIC STŘÍBRA PRO DETEKCI LÁTEK POMOCÍ POVRCHEM ZESÍLENÉ RAMANOVY SPEKTROSKOPIE
Barbora Štefková, Robert Prucek, Tomáš Ingr 148

3Po28 FOTOINDUKOVANÁ KONVERZE CO_2 ZA ARKTICKÝCH PODMÍNEK
Anna Zabelina, Denis Zabelin, Zdeňka Kolská, Oleksiy Lyutakov, Václav Švorčík 149

3Po29 STUDY OF PREPARATION AND CHARACTERIZATION OF ORGANIC PRECURSORS OF SINGLE-MOLECULE MAGNETS BASED ON 3d/4f METALS
Svitlana Vitushkina, Juraj Kuchár, Veronika Kuchárová 149

3Po30 KOMPOZITNÍ MOF-UHLÍKATÉ MATERIÁLY PRO SORPCI VODÍKU
Jana Vyhlídalová, Tomáš Zelenka,Aleš Badač,Miroslav Almáši 150

3Po31 PYRIDINE-BASED MACROCYCLIC LIGANDS: SYNTHESIS OPTIMIZATION, COMPLEX PREPARATION AND THEIR ROLE IN THE FILED OF MOLECULAR MAGNETISM
Eva Zahradníková, Céline Pichon, Jean-Pascal Sutter, Radovan Herchel, Petr Halaš, Bohuslav Drahoš.....150

3Po32 GRAPHENE AS A PROMISING ADDITIVE TO HIERARCHICALLY POROUS CARBON MONOLITHS FOR ENHANCED H_2 AND CO_2 SORPTION
Gabriela Zelenková, Tomáš Zelenka, Miroslav Almáši, Michala Soldánová.....151

Postery - sekcia 4 Organická chémia.....151

4Po01 TVORBA C–C VÄZIEB POMOCOU C–H AKTIVÁCIÍ NA BIARYLOVÝCH SUBSTRÁTOCH
Tomáš Čičvák, Martin Putala.....151

4Po02 VISIBLE-LIGHT-MEDIATED DENITRATIVE CROSS-COUPLING
Katarína Ráchel Detková, Branislav Ferko, Michaela Marčeková, Jana Doháňošová, Dušan Berkeš, Pavol Jakubec....152

4Po03 SYNTHESIS OF NEW PERYLENE DERIVATIVES VIA RING-EXPANSION REACTION
Lucia Feriancová, Ivana Císařová, Martin Kotora....152

4Po04 BROMINATED DIAMOND SURFACE AS A REACTIVE INTERMEDIATE FOR FURTHER DERIVATIZATIONS
Ema Fialova, Jakub Copak, Jiri Schimer, Petr Cigler....153

4Po05 XMAN – VERSATILE LIPID NANOPARTICLES FOR NUCLEIC ACID DELIVERY
Bedřich Formánek, Pavel Švec, Lenka Loukotová, Václav Vaněk, Anastasiia Priss, Veronika Aulichová, Silvia Petrezselyová, Andrea Brázdová, Lenka Vaneková, František Sedlák, Petr Cígler,Klára Grantz Šašková....153

4Po06 SYNTÉZA, ŠTRUKTÚRA A FARMAKOLIGICKÝ PROFIL *N*-ACYLHYDRAZÓNOV ODVODENÝCH OD PERILLALDEHYDU A MYRTENALU
Monika Garberová, Mária Vilková, Ivan Potočňák, Monika Tvrdoňová, Martina Bago-Pilátová, Zuzana Kudličková, Alexandra Kešeľáková, Ján Elečko....154

4Po07 SYNTÉZA AMIDŮ KYSELINY SKOŘICOVÉ S ANTIMIKROBIÁLNÍ AKTIVITOU
Tomáš Strhársky, Dominika Pindjaková, Jaroslava Jamrichová, Juliana Lavičková, Veronika Kadlecová, Jiří Kos, Tomáš Goněc, Josef Jampílek....154

4Po08 CU(II) COMPLEXES OF *O,N,O*-QUINAZOLINONE DONOR LIGANDS AS NEW BIOACTIVE COMPOUNDS
Jana Hricovíniová, Renáta Vadkertiová, Zuzana Hricovíniová....155

4Po09 HALOGENATED PRALIDOXIME DERIVATIVES AS POTENTIAL REACTIVATORS OF INHIBITED CHOLINESTERASES: SYNTHESIS AND *IN VITRO* EVALUATION
Karolína Knittelová, David Malinak, Adela Fuchsova, Rudolf Andrys, Kamil Musilek....155

4Po10 NONSYMMETRICAL MONOQUATERNARY AMMONIUM SALTS AS POTENTIAL REACTIVATORS OF INHIBITED CHOLINESTERASES: SYNTHESIS AND *IN VITRO* EVALUATION
Zuzana Kohoutova, David Malinak, Rudolf Andrys, Marketa Neugebauerova, Miroslav Psotka, Kamil Musilek....156

4Po11 SYNTÉZA A BIOLOGICKÁ AKTIVITA NOVÝCH DERIVÁTŮ RHODANINU A THIAZOLIDIN-2,4-DIONU
Adéla Šimková, Enikő Šikorová, Šárka Štěpánková, Klára Konečná, Ondřej Janďourek, Jarmila Vinšová, Martin Krátký....156

4Po12 DETERMINATION OF pK_a OF ADAMANTANE-BASED LIPID NANOPARTICLES
Olha Lytvynenko, Václav Vaněk, Anastasiia Priss, Klára Grantz Šašková, Petr Cígler....157

4Po13 INDUKOVANÉ ŠTIEPENIE N-N A C-F VÄZIEB AROMATICKÝCH PERFLUÓROVANÝCH HYDRAZÓNOV - NOVÁ METÓDA SYNTÉZY AROMATICKÝCH A HETEROAROMATICKÝCH NITRILOV A 2,3,5,6-TETRAFLUÓRANILÍNU
Dušan Bortňák, Daniel Végh, Branislav Pavílek, Viktor Milata....157

4Po14 SYNTHESIS OF NOVEL COMPOUNDS TARGETING NEUROINFLAMMATION AND CHOLINERGIC DEFICIT IN ALZHEIMER´S DISEASE
Miroslav Psotka, Zuzana Kohoutova, Karolina Knittelova, David Malinak, Rudolf Andrys, Kamil Musilek, Stanislav Gobec....158

4Po15 C(2)-REGIOSELEKTÍVNA PRIAMA ARYLÁCIA CHROMÓNOV
Karin Schniererová, Henrieta Stankovičová, Martin Putala....159

4Po16 FLUÓROVANÉ PYRÁNY AKO POTENCIÁLNE BIOLOGICKY AKTÍVNE LÁTKY
Klára Stankovianska, Mária Mečiarová, Radovan Šebesta....159

4Po17 SYNTÉZA BOROVÝCH HETEROCYKLŮ VYCHÁZEJÍCÍ Z BIS(ENAMINOAMIDŮ)
Markéta Svobodová, Eliška Smejkalová, Nikol Švábková....159

4Po18 TOTÁLNA SYNTÉZA NOVÝCH PYROLIDÍNOVÝCH SFINGOMIMETÍK
Jana Špaková Raschmanová, Martin Fábian, Miroslava Martinková, Adam Sudzina, Martina Bago Pilátová 160

4Po19 STRUCTURE OF EXOPOLYSACCHARIDE PRODUCED BY CYANOBACTERIA NOSTOC CF. LINCKIA
Iveta Uhliariková, Mária Matulová, Jaromír Lukavský, Jozef Turjan, Peter Capek 161

4Po20 STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA NOVÝCH BROUSSONETÍNOVÝCH ANALÓGOV
Monika Tvrdoňová, Yuliia Zuzak 161

Postery - sekcia 5 Vyučovanie a história chémie 162

5Po01 CHEMICKÉ A ŠTRUKTÚRNE ZLOŽENIE RESPIRÁTOROV A ICH VPLYV NOSENIA NA ROZPOZNÁVANIE EMÓCIÍ ŽIAKOV ZÁKLADNÝCH ŠKÔL A GYMNÁZIÍ
Lujza Grambličková, Monika Jerigová 162

5Po02 NITRACE FENOLU V PŘÍTOMNOSTI MIKROVLN JAKO VÝUKOVÝ EXPERIMENT
Zuzana Morávková, Jiří Havlíček, Rafael Doležal, Martin Bílek, Karel Kolář 163

5Po03 MULTIMEDIÁLNÍ VZDĚLÁVÁNÍ V CHEMII
Radana Koudelíková,Pavel Štarha 163

5Po04 PROFIL A ŠTUDIJNÝ PLÁN ABSOLVENTA NOVÉHO PROFESIJNE ORIENTOVANÉHO ŠTUDIJNÉHO PROGRAMU „CHEMICKÝ LABORANT - ŠPECIALISTA“
Zuzana Vargová, Miroslav Almáši, Michaela Rendošová, Renáta Oriňaková, Slávka Hamuľaková, Viktor Víglaský, Jana Šandrejová, Mária Ganajová, Jana Dinajová, Milan Burčák, Igor Danielovič, Igor Chomča, Peter Marcinov 164

Postery - sekcia 6 Aplikovaná chémia, životné prostredie a polyméry 165

6Po01 DOES DIESEL CONTAMINATED SOIL AFFECT MISCANTHUS BIOMASS FOR FURTHER THERMAL UTILIZATION?
Hana Burdová, Zdenka Kwoczynski, Diana Nebeská, Karim Suhail Al Souki, Dominik Pilnaj, Barbora Grycová, Kateřina Klemencová, Pavel Leštinský, Pavel Kuráň, Josef Trögl 165

6Po02 MODELLING OF GLYPHOSATE SORPTION ON ACTIVATED CARBON
Milan Bernauer, Kirill Iablochkin, Maryna Kantserova, Martin Zlámal, Vlastimil Fíla 165

6Po03 MIXED MATRIX MEMBRANES BASED ON 6FDA-BISP FOR BIOGAS PURIFICATION
Kirill Iablochkin, Milan Bernauer, Zdeněk Sofer, Vlastimil Fila 166

6Po04 STANOVENIE ACIDITY V SYSTÉMOCH OBSAHUJÚCICH CHOLÍN CHLORID, KYSELINU MLIEČNU A DIOLY
Veronika Jančíková, Michal Jablonský 166

6Po05 ŠTÚDIUM MIKROŠTRUKTURÁLNYCH VLASTNOSTÍ VYTVRDENÉHO BISFENOLU A DIGLYCIDYLÉTERU POMOCOU FRONTÁLNEJ POLYMERIZÁCIE
David Pavel Královič, Katarína Cifraničová, Ondrej Šauša, Helena Švajdlenková 167

6Po06 DEGRADATION OF TEXTILE DYES FROM WASTEWATER BY OXIDATION PROCESSES
Olga Krupková, Libor Dušek 167

6Po07 VYUŽITIE ZHÁŠAČOV K CHARAKTERIZÁCII ELEKTRÓD
Gabriela Kuchtová 167

6Po08 ŠTÚDIUM EKOTOXICITY XENOBIOTÍK NA VYBRANÝCH RIASACH A KÔROVCOCH
Miloš Lukáč, Martin Bajcura, Martin Pisárčik 168

6Po09 DEVELOPMENT OF FILAMENTS FOR FDM 3D PRINTING OF ORAL SOLID DOSAGE FORMS
Jana Macháčková, Marie Nevyhoštěná, Kevin Matzick, Alena Komersová 168

6Po10 ANTROPOGENNÍ GADOLINIUM VSTUPUJÍCÍ DO POTRAVNÍHO REŤEZCE
Frederika Mišíková, Anna Krejčová, Jan Patočka 169

6Po11 RELATIONSHIP BETWEEN THE STRUCTURE-BASED CLASSIFICATION AND SUBSTRATE SPECIFICITY OF α-L-ARABINOFURANOSIDASES
Walid Moussa, Vladimír Puchart 169

6Po12 ROOM TEMPERATURE SYNTHESIS AND AMINE-FUNCTIONALIZATION OF ZIF-8 FOR ENHANCED CO_2 CAPTURE
Viktorie Neubertová, Václav Švorčík, Zdeňka Kolská 170

6Po13 DISSOLUTION TESTING OF NEW POTENTIAL DRUGS FOR ALZHEIMER'S DISEASE
Marie Nevyhoštěná, Alena Komersová, Jana Macháčková, Vladimír Pejchal, Šárka Štěpánková 170

6Po14 PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE PORÉZNÍCH UHLÍKATÝCH MONOLITŮ NA BÁZI CELULÓZY
Alžběta Parchaňská 171

6Po15 HYDROPHILIC POLYMER CONJUGATES WITH OCTAHEDRAL MOLYBDENUM CLUSTERS: POTENTIAL NANOMATERIALS FOR PHOTODYNAMIC THERAPY
Michal Pechar, Robert Pola, Marina Rodrigues Tavares, Kaplan Kirakci, Tomáš Přibyl, Jaroslav Zelenka, Tomáš Ruml, Kamil Lang, Tomáš Etrych 171

6Po16 PŘÍPRAVA A HODNOCENÍ OBALOVACÍCH SMĚSÍ PRO SUCHÉ OBALOVÁNÍ LÉKOVÝCH MIKROFOREM S ŘÍZENÝM UVOLŇOVÁNÍM
Lucie Sedláčková, Aleš Franc, Sylvie Pavloková 172

6Po17 FLUORESCENT NANODIAMONDS MODIFIED WITH HYALURONIC ACID FOR TARGETED CANCER CELL THERANOSTICS
Hana Španielová, Jitka NeburkováJan Bartoň, Petr Cígler 172

6Po18 3D TISK INDIVIDUALIZOVANÉ LÉKOVÉ FORMY
Martin Veselý, Jan Elbl, David Záruba 173

6Po19 SEPARACE VYBRANÝCH MIKROPOLUTANTŮ Z VODY S RŮZNOU SOLNOSTÍ POMOCÍ NANOFILTRACE
Martin Zlámal, Karel Pecha, Zoran Zwaan 173

6Po20 FAST SURFACE HYDROPHILIZATION VIA ATMOSPHERIC PRESSURE PLASMA POLYMERIZATION FOR BIOLOGICAL AND TECHNICAL APPLICATIONS
Hana Dvořáková, Jan Čech, Monika Stupavská, Lubomír Prokeš, Jana Jurmanová, Vilma Buršíková, Jozef Ráheľ, Pavel Sťahel 173

Postery - sekcia 7 Chemprogress - chemické technológie 175

7Po01 MATEMATICKÉ MODELOVÁNÍ VLIVU GEOMETRIE KANÁLU PRO PROUDĚNÍ PLYNŮ LISOVANÝCH KOVOVÝCH BIPOLÁRNÍCH DESEK NA VÝKON PEM PALIVOVÉHO ČLÁNKU
Miroslav Hala, Roman Kodým, Martin Prokop, Martin Paidar, Karel Bouzek 175

7Po02 LIKVIDACE ODPADŮ Z VÝROBY TŘASKAVIN
Libor Mastný, Miloslav Lhotka 175

7Po03 STUDIUM OXIDACE ŽELEZNATÝCH IONTŮ VZDUCHEM
Ivona Sedlářová, Petr Lodňánek, Martin Zlámal, Jan Vídenský 175

7Po04 ŽELEZANY – ELEKTROCHEMICKÁ PRÍPRAVA
Renáta Števuľová, Kamil Kerekeš, Ján Híveš 176

7Po05 PULZNÁ LASEROVÁ DEPOZÍCIA KOVOVÝCH VRSTIEV
Jaroslav Bruncko, Katarína Koťuhová, Miroslav Michalka, Monika Jerigová 176

Autorský index 178

Program prednášok 185

SEKCIA 1 ANALYTICKÁ CHÉMIA 185
SEKCIA 2 FYZIKÁLNA CHÉMIA 189
SEKCIA 3 ANORGANICKÁ A MATERIÁLOVÁ CHÉMIA 191
SEKCIA 4 ORGANICKÁ CHÉMIA 194
SEKCIA 5 VYUČOVANIE A HISTÓRIA CHÉMIE 198
SEKCIA 6 APLIKOVANÁ CHÉMIA, ŽIVOTNÉ PROSTREDIE A POLYMÉRY 200
SEKCIA 7 CHEMPROGRESS - CHEMICKÉ TECHNOLÓGIE 203
CENA MARTY SALIŠOVEJ 206

Zoznam posterov 208

UTOROK 5. 9. 2023
Sekcia 1 Analytická chémia 208
Sekcia 2 Fyzikálna chémia 209
Sekcia 3 Anorganická a materiálová chémia 209
Sekcia 4 Organická chémia 210
Sekcia 5 Vyučovanie a história chémie 211
Sekcia 6 Aplikovaná chémia, životné prostredie a polyméry 211
Sekcia 7 Chemprogress – chemické technológie 212
STREDA 6. 9. 2023
Sekcia 1 Analytická chémia 212
Sekcia 2 Fyzikálna chémia 213
Sekcia 3 Anorganická a materiálová chémia 213
Sekcia 4 Organická chémia 214
Sekcia 5 Vyučovanie a história chémie 215
Sekcia 6 Aplikovaná chémia, životné prostredie a polyméry 215
Sekcia 7 Chemprogress – chemické technológie 216

PLENÁRNA PREDNÁŠKA

UNRAVELLING BIOMOLECULAR STRUCTURE, INTERACTIONS AND DYNAMICS WITH MASS PHOTOMETRY

Philipp Kukura[1,2]

[1]*Physical and Theoretical Chemistry Laboratory, Department of Chemistry, University of Oxford, United Kingdom*
[2]*Kavli Institute for Nanoscience Discovery, University of Oxford, United Kingdom,*
philipp.kukura@chem.ox.ac.uk

Interactions between biomolecules control the processes of life, and their malfunction in disease, making their characterization and quantification essential to our understanding of the underlying molecular mechanisms. A major challenge stems from the intrinsic heterogeneity and dynamics of molecular machines and its correlation with function. I will show how mass photometry (MP), the accurate and precise mass measurement by light scattering, enables the study of stoichiometries, structure, energetics and kinetics of individual biomolecules in solution. These capabilities provide a dynamic view of complex processes at the macromolecular level, which I will illustrate with recent results revealing the importance of intermolecular interactions for viral infection and therapeutic intervention. In addition, I will show that label-free single protein imaging allows for high-precision localization and tracking with a performance comparable to fluorescence-based methods.

POZVANÉ PREDNÁŠKY

PP1
ÚLOHA CHÉMIE A MATERIÁLOVÝCH ANALÝZ V PROCESOCH OCHRANY KULTÚRNEHO DEDIČSTVA

Milena Reháková

Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav prírodných a syntetických polymérov, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, milena.rehakova@stuba.sk

Konzervačná veda *(conservation science)* je pomerne mladá interdisciplinárna oblasť, zaoberajúca sa predovšetkým odhaľovaním zloženia a štruktúry materiálov používaných autormi umeleckých diel a ďalších historických objektov kultúrneho dedičstva (ďalej len artefakty) s cieľom lepšieho pochopenia nehmotnej hodnoty týchto objektov. Prioritami využitia súhrnu metodológií konzervačnej vedy môže byť autentifikácia (identifikácia pôvodu, autorstva, školy, miesta vzniku a pod.), poznanie technológií použitých pri vzniku artefaktu, poznanie mechanizmov premeny – degradácie materiálov v čase alebo určenie najvhodnejšieho spôsobu konzervovania alebo reštaurovania. Súčasťou konzervačnej vedy je aj vývoj nových metodík konzervovania, reštauro–vania, uchová–vania a sprístupňovania artefaktov. Ako je z uvedeného zrejmé, vedecká a odborná činnosť konzervačného vedca je postavená predovšetkým na syntéze poznatkov z oblasti fyzikálnej a analy–tickej chémie, anorganickej a organickej chémie, materiálového inžinierstva a chemických technológií, ale aj na poznaní histórie chemických materiálov a postupov a intenzívnej spolupráci a komunikácii s reštaurátormi, konzervátormi, pracovníkmi pamiatkovej ochrany a umeleckými historikmi. V tomto príspevku je (aj na konkrétnych príkladoch a projektoch) predsta–vený vklad konzervačného vedca v kontexte ochrany kultúrneho dedičstva v ostatných desia–tich rokoch, počas ktorých v prostredí Slovenskej republiky bola (vy)tvorená odborná komunita zaoberajúca sa inter–disciplinárnym výskumom v uvedenej oblasti.

Poďakovanie za finančnú podporu patrí projektu Ochrana a konzervovanie novodobých objektov kultúrneho dedičstva s obsahom plastov (APVV-20-0410).

[1] Ward, P: The Nature of Conservation. A Race Against Time, The Getty Institute, California, 1989, the 2nd edition.
[2] Townsend, J.H., What is Conservation Science, *Macromolecular Symposia*, 236, 1-11 (2005).
[3] Vizárová, K., Reháková, M., Urlandová, A., Tiňo, R.: Rozvoj konzervačnej vedy na Slovensku a jej úloha v pamiatkovej ochrane. In Bardkontakt 2022. Zborník z konferencie s medzinárodnou účasťou: Problematika mestských pamiatkových centier. Bardejov, 22. - 23. august 2022. 1. vydanie. Bardejov, 2022, s. 74-79.

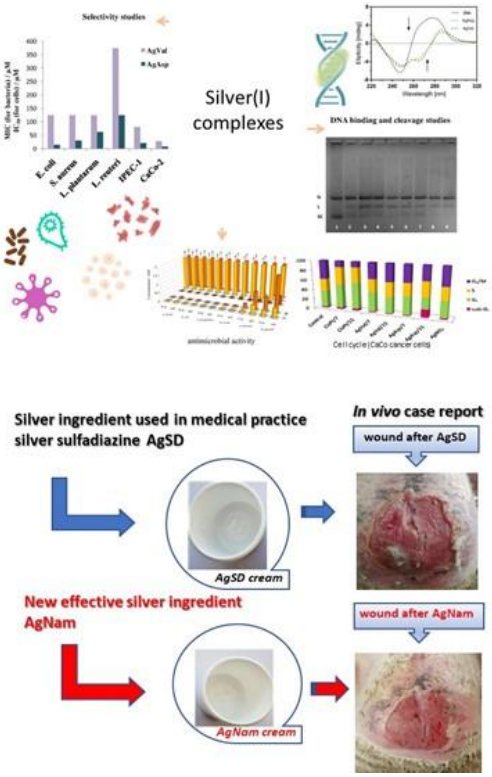
PP2
BIOLOGICKÝ POTENCIÁL KOORDINAČNÝCH ZLÚČENÍN ZINKU A STRIEBRA

Zuzana Vargová

Katedra anorganickej chémie, Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11, Košice, zuzana.vargova@upjs.sk

Rezistencia rôznych mikróbov na antibiotiká v posledných rokoch vedie k rozvoju ochorení, ktoré je problematické liečiť súčasne dostupnými antibiotikami [1]. K najznámejším patrí rozvinutá rezistencia *S. pneumoniae* na penicilín a ostatné antibiotiká, *S. aureus* na meticilín, *M. tuber–culosis* na anti–tuberkulotiká, *N. gonorrhoea*e na beta–laktámy a chinolóny, *E. coli* na fluorované chinolóny, cefalosporíny, aminopenicilíny a kotrimoxazol. Všetky organizmy od baktérií až po cicavce, produkujú látky, ako základnú vrodenú imunologickú reakciu, ktorými sa voči patogénom bránia [1]. Prevažná väčšina z nich sú antimikrobiálne peptidy (AMP, katiónové alebo aniónové) s krátkymi aminokyselinovými (AK) sekvenciami, ktoré primárne pôsobia bakterio–staticky a dokonca aj baktericídne ako obrana proti širokému spektru patogénov. Účinná aktivita AMP je regulovaná chemickými a fyzikálnymi vlastnosťami ako sú hydrofóbnosť, elektrostatické sily, konformačné prechody a rovnováha samousporiadania. Úplný spôsob účinku nie je známy, avšak elektrostatická príťažlivosť medzi negatívne nabitými zložkami patogénnych alebo nádorových buniek a pozitívne nabitými časťami AMP sú rozhodujúce pre ich interakciu a selektívne narušenie membrán [1]. Je známe, že niektoré AMP, vykazujú aj cytotoxické účinky voči rakovinovým bunkám. Viažu sa na negatívne nabité fosfatidylserínové skupiny, ktoré sú selektívne lokalizované na vonkajšom povrchu plazma–tických membrán rakovinových buniek [1]. Sú však známe aj iné mechanizmy účinku.

Na základe vyššie uvedených faktov jednou z myšlienok ako imunitnému systému pomôcť v boji voči infekčným a rakovinovým chorobám je spájať ióny kovov s antimikrobiálnymi (AMB) a protirakovinovými účinkami (napr. Ag^{+}, Zn^{2+}, Cu^{2+}, Pt^{2+}, Pd^{2+}, Ru^{3+}, Ga^{3+}) s efektívnymi orga–nickými ligandami, ktoré sú svojou štruktúrou a vlastnosťami podobné AMP. V súlade s tým sme pripravili zlúčeniny zinku a striebra s vybranými AK a dipeptidmi (zložky (AMP)) ako aj s ligandami, ktoré sú prirodzenými zložkami bioštruktúr alebo sú metabolitmi rôznych biochemických procesov (heterocyklické organické kyseliny na báze pyridínu). V rámci prednášky bude prezentovaný prehľad dosiahnu–tých výsledkov za obdobie posledných 10 rokov so zreteľom na sľubný potenciál vybraných zlúčenín pre prax [2, 3].



Obr. 1 Biologická aktivita Ag(I) komplexov [2, 3].

[1] Fleitas O., Franco O.L., *Front. Microbiol. 24*, 381 (2016); Kuzderová G., Rendošová M., Gyepes R., Sovová S., Sabolová D., Vilková M., Olejníková P., Bačová I., Stokič S., Kello M., Vargová Z.: *Molecules. 26*, 6335 (2021).

[2] Rendošová M., Gyepes R., Maruščaková I.C., Mudroňová D., Sabolová D., Kello M., Vilková M., Almaši M., Huntošová V., Zemek O., Vargová Z.: *Dalton Trans.*, 50, 936 (2021).

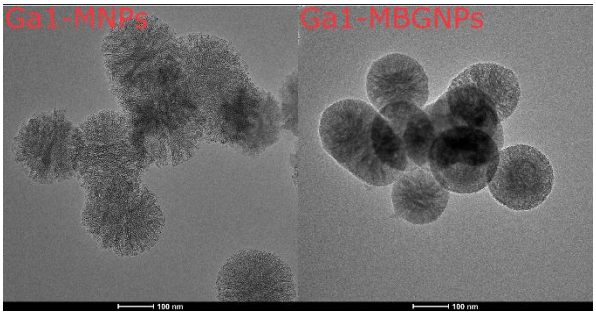
[3] Sovová S., Megyesi Š. L., Mudroňová D., Mudroň P., Harvanová J., Rendošová M., Goga M., Tkáčiková Ľ., Vargová Z.: *Acta Pharm. 73*, 311 (2023).

PP3
MÔŽE NÁM SKLO POMÔCŤ V BOJI PROTI BAKTÉRIÁM REZISTENTNÝM NA ANTIBIOTIKÁ?

Dušan Galusek

Centrum pre funkčné a povrchovo funkcionalizované sklá (FunGlass), Trenčianska univerzita Alexandra Dubčeka v Trenčíne, 91150 Trenčín , dusan.galusek@tnuni.sk

Stále rastúci počet kmeňov patogénnych mikroorganizmov rezistentných na antibiotiká (napr. MRSA – Methicillin-resistant Staphylo–coccus aureus) predstavujú reálnu hrozbu pre zdravie ľudstva. Tento problém je ešte zosilnený faktormi, ako sú horizontálny transfer génov medzi rôznymi bakteriálnymi kmeňmi, ktoré umožňujú získať rezistenciu na antibiotiká aj baktériám, ktoré nie sú priamymi potomkami už rezistentných kmeňov [1], ako aj faktom že farmaceutické firmy sa len neochotne púšťajú do vývoja nových druhov antibiotík kvôli vysokým nákladom. Situáciu ďalej komplikuje fakt, že doba účinnosti nových antibiotík je pomerne obmedzená, a baktérie získavajú rezistenciu rýchlejšie, ako sme nové antibiotiká schopní uvádzať na trh. Je preto nevyhnutné navrhnúť nové stratégie boja s patogénnymi mikroorga–nizmami. Zaujímavú alternatívu v tejto oblasti predstavujú viaceré anorganické ióny, ktorých antibakteriálne vlastnosti sú dobre zdokumen–tované – napr. Ag^{+}, Zn^{2+}, Ga^{3+}, Ce^{3+}, atď. Takéto ióny môžu byť zabudované v štruktúre rôznych bioaktívnych skiel, ktoré sa v telovom prostredí postupne rozpúšťajú, pričom dochádza k riadenému uvoľňovaniu iónov s antibakte–riálnym účinkom. Tento príspevok poskytuje prehľad výskumných aktivít na pracovisku FunGlass, zameraných na vývoj a testovanie bioaktívnych skiel a kompozitov s biopolymérnou matricou dopovanou bioaktívnymi sklami obsahujúcimi ióny s terapeutickým, antibakte–riálnym účinkom a ich testovanie z pohľadu ich antibakteriálnej a antimikrobiálnej aktivity voči vybraným Gram-pozitívnym a Gram-negatívnym baktériám a mikroskopickým hubám.



Obr. 1 Mezoporézne bioaktívne sklené nanočastice dopované Ga.

Táto prezentácia je súčasťou diseminačných aktivít projektu FunGlass. Tento projekt získal financovanie z programu Európskej únie Horizon 2020 v rámci grantu číslo 739566.

[1] Arnold B.J.: *Nature Reviews Microbiology.* 20, 206 (2022).

PP4
PRÍNOS ENZYMATICKEJ ACYLÁCIE KU SYNTÉZE PRÍRODNÝCH GLYKOFENOLÍK

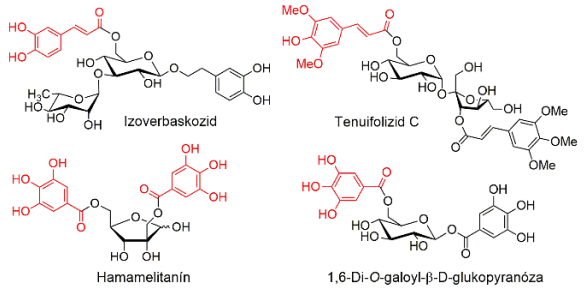
Mária Mastihubová[1]

[1]*Chemický ústav SAV, v. v. i., Dúbravská cesta 5807/9, 845 38 Bratislava, maria.mastihubova@savba.sk*

Štruktúry sekundárnych metabolitov rastlín so sľubným terapeutickým potenciálom sú v litera–túre často definované ako glykozidy alebo oligosacharidy dekorované fenolickými kyselina–mi [1]. Kyselina ferulová, kávová, kumarová, sinapová alebo galová samotné sú intenzívne študované pre ich antioxidačné vlastnosti a z nich vyplývajúce zdravotné benefity. Ich prírodné cukorné estery majú odlišné fyzikálnochemické vlastnosti, čo sa prejavuje aj v rôznorodosti ich biologických aktivít. Cukry ako chirálne polyhy–droxylované molekuly zabezpečujú obrovskú variabilitu diskutovaných štruktúr. Príprava látok tohto typu konvenčnými metódami organickej syntézy predstavuje častokrát výzvu, čo však nemusí byť problém pri použití dostupných selektívnych biokatalyzátorov – lipáz a esteráz.

Prednáška sa bude venovať problematike hľadania biokatalyzátorov s požadovanou sub–strátovou špecificitou [2] ako aj syntéze niektorých analytických prób pre tento proces. Reakčné podmienky enzymatickej acylácie sú častokrát pre danú kombináciu enzýmu a acyldo–nora šité na mieru a ich optimalizácia predstavuje dôležitú súčasť celej syntézy. Vhodný výber organického rozpúšťadla je pre stabilitu enzýmu, rýchlosť reakcie ako aj konverziu veľmi dôležitý. V prednáške bude prezentovaných niekoľko

úspešných syntéz glykofenolík (fenyletanoidných glykozidov, fenylpropanoidných sacharóz, hama–melitanínu [3] a galoylovaného glukogalínu, Obr. 1). V syntézach sa okrem priamej enzyma–tickej funkcionalizácie východiskových látok fenolickým acyldonorom využíva aj regioselektívna enzymatická acetylácia pre uskutočnenie chemickej acylácie glykozidov do polôh, kde konkrétna enzymatická acylácia nie je možná.



Obr. 1 Príklady syntetizovaných glykofenolík.

[1] Výskum bol podporený projektami: APVV-18-0188, VEGA 2/0111/22, COST Action GREENERING (CA 18224).
[2] Tian Y. a kol.: *Molecules 21*, 1402 (2016).
[3] Mastihubová M., Mastihuba V.: *Bioorg. Med. Chem. Lett. 23*, 5389 (2013).
[4] Mastihubová M., Mastihuba V.: *Biomolecules 13*, 519 (2023).

PP5
BOREM DOPOVANÝ DIAMANT: PERSPEKTIVY "NETRADIČNÍHO" ELEKTRODOVÉHO MATERIÁLU PO TŘICETI LETECH VÝZKUMU

Karolina Schwarzová-Pecková[1], Simona Baluchová[1], Hana Dejmková[1], Jan Fischer[1], Jan Hrabovský[2], Nadezhda Bulgakova[2], Miroslav Fojta[3], O. A. Williams[4], Petr Ashcheulov[5], Andrew Taylor[5]

[1]*Univerzita Karlova, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Albertov 2038/6, 128 00 Praha 2, Česká republika, karolina.schwarzova@natur.cuni.cz*
[2]*HiLASE Centre, FZU – Fyzikální ústav AVČR v. v. i., Za Radnicí 828, 252 41 Dolní Břežany, Česká republika*
[3]*Biofyzikální ústav AVČR v. v. i., Královopolská 135, 612 00 Brno, Česká republika*
[4]*School of Physics and Astronomy, Cardiff University, CF10 3AT, Cardiff, Wales, Velká Británie*
[5]*FZU – Fyzikální ústav AVČR v. v. i., Na Slovance 1999/2, 182 21 Praha 8, Česká republika*

Třicet let výzkumu přineslo bórem dopovanému diamantu (BDD) širokou popularitu v oblastech elektroanalýzy či degradace organických látek. Za klíčové faktory ovlivňující elektrochemické vlastnosti BDD jako je kinetika přenosu náboje, vodivost, kapacita elektrodové dvojvrstvy či potenciálové okno je považován obsah nediamantového uhlíku, úroveň dopování bórem a terminace povrchu. Konvenční BDD elektrody, nanesené na Si nebo kovové substráty, mají polykrystalickou strukturu, která je výsledkem depozice BDD na diamantové nanočástice, sloužící jako nukleační centra pro chemickou depozici z plynné fáze. Modifikace povrchu BDD (např. chemická povrchová modifikace nebo strukturování) vede ke změně elektrochemických vlastností BDD a umožňuje optimalizaci pro analytické aplikace [1].

V tomto příspěvku budou prezentovány výsledky nejen našeho výzkumu v této oblasti zaměřené na následující nové přístupy pro přípravu a modifikaci vrstev BDD:

1) Příprava hladkých BDD povrchů vykazujících rychlou kinetiku přenosu náboje (chemicko-mechanické leštění konvenčního polykrystalického BDD [2], depozice BDD na monokrystalech diamantu).
2) Bodová strukturace povrchu BDD laserem pro kontrolovanou konverzi sp^3 uhlíku na sp^2 uhlík.
3) Příprava porézních BDD vrstev pro vsádkové a průtokové elektrochemické cely [3].

Perspektivní aplikace těchto BDD vrstev budou demonstrovány na příkladech elektroanalytických metod pro detekci neurotransmiterů a jiných organických látek, amperometrických průtoko–vých měření či konstrukci enzymatických hybri–dizačních sensorů pro detekci DNA.

Tento výzkum probíhá za finanční podpory grantu GAČR (Projekt GACR 23-05688S).

[1] Baluchová S., Daňhel A., Dejmková H., Ostatná V., Fojta M., Schwarzová-Pecková K.: *Anal. Chim. Acta 1077*, 30 (2019).
[2] Zelensky M., Fischer J., Baluchova S., Klimša L., Kopeček J., Vondráček M., Fekete L., Eidenschink J., Matysik F.-M., Mandal S., Williams O., Hromadova M., Mortet V., Schwarzova-Peckova K., Taylor A.: *Carbon 203*, 363 (2023).
[3] Baroch M., Baluchova S., Taylor A., Míka L., Fischer J., Dejmková H., Mortet V., Sedláková S., Klimša L., Kopeček J., Schwarzova-Peckova K.: *Electrochim. Acta. 426*, 140758 (2022).

PREDNÁŠKY - SEKCIA 1: ANALYTICKÁ CHÉMIA

1P01
BIOCHAR AKO PERSPEKTÍVNY A ZELENÝ ELEKTRÓDOVÝ MATERIÁL PRE ELEKTROCHEMICKÉ SENZORY

Olha Sarakhman[1], Mária Purdeková[1], Michal Hatala[2], Pavol Gemeiner[2], Ľubomír Švorc[1]

[1]Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav analytickej chémie, Radlinského 9, 812 37, Bratislava, lubomir.svorc@stuba.sk
[2]Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Oddelenie polygrafie a aplikovanej fotochémie, Radlinského 9, 812 37, Bratislava

Biochar (biouhlie) si v dnešnej dobe získava čoraz väčšiu pozornosť, pretože jeho výroba v kombinácii s ukladaním do pôdy sa javí ako jeden z možných prostriedkov na zníženie koncentrácie atmosférického CO_2. Biochar je tuhý produkt získaný pyrolýzou biomasy v procese realizovanom pri teplotách nad 250 °C. Jedná sa o vysoko porézny uhlíkový materiál, ktorý si získava pozornosť aj analytických chemikov. Účinnosť biocharu súvisí s veľkosťou pórov a hlavne s „reaktívnymi“ funkčnými skupinami naviazanými na jeho povrchu (napr. karboxylové, hydroxylové a fenolové skupiny). Vlastnosti biocharu sú veľmi podobné charakteristikám nanomateriálov široko používaných v elektrochémii (sadze, grafén, nanorúrky a nanovlákna). Napriek obrovskému pokroku vo vývoji miniaturizovaných a prenosných zariadení a analytických systémov zostávajú elektrochemické senzory pripravené zo zelených, alternatívnych a lacných materiálov kľúčovou výzvou v elektroanalytickej chémii, nanotechnológii a chémii materiálov. Príspevok pojednáva o základnej charakterizácii a analytickej aplikácii novej generácie sieťotlačených elektrochemických senzorov na báze materiálu z biocharu. Pri sledovaní elektrochemického správania bolo zistené, že tieto senzory poskytujú veľkú účinnosť pri akumulácii modelovej látky - paracetamolu, čím sa výrazne zlepšila citlivosť stanovenia. Praktická použiteľnosť senzorov bola úspešne potvrdená analýzou farmaceutických prípravkov.

Tento príspevok vznikol s podporou VEGA MŠVVaŠ SR a SAV (projekt č. 1/0159/20) a bilaterálneho APVV projektu Slovensko – Srbsko (SK-SRB-21-0019).

1P02
VOLTAMPÉROMETRICKÁ METÓDA PRE DETEKCIU OXIDU SIRIČITÉHO VO VÍNE ZALOŽENÁ NA ELEKTRÓDE Z DIAMANTU DOPOVANÉHO BÓROM A REAKČNEJ ELEKTROCHÉMII BEZ INTERFERENCIÍ

Eva Culková[1], Miroslav Rievaj[1], Peter Tomčík[1]

[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 novú, jednoduchú a vysoko citlivú analytickú metódu pre stanovenie oxidu siričitého vo víne ako reálnej vzorke s pomerne komplikovanou matricou. Detekcia vyššie uvedeného analytu je založená na elektrochemickej generácii jódu z jodidu na nemodifikovanej elektróde z diamantu dopovaného bórom v prítomnosti 0,1 mol dm^{-3} $HClO_4$ ako základného elektrolytu. Elektrochemicky generovaný jód reaguje s oxidom siričitým za tvorby jodidových iónov a kyseliny sírovej (Bunsenova reakcia). Produkt tejto reakcie jodid, difunduje späť na elektródu a oxiduje sa znovu. Toto chemické cyklovanie zosiluje voltampérometrickú odozvu elektródy z diamantu dopovaného bórom. Selektivita stanovenia bola zabezpečená NaOH a formaldehydom počas prípravy vzorky a slepý pokus bol tiež meraný a zohľadnený. Navrhnutou technikou sa dosiahol detekčný limit rádovo 10^{-6} - 10^{-7} mol dm^{-3}. Avšak obsah oxidu siričitého vo víne je však výrazne vyšší, čo môže viesť k presnejším a spoľahlivejším výsledkom analýzy.

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

[1] Culková E., Lukáčová-Chomisteková Z., Bellová R., Rievaj M., Švancarová-Laštincová J., Tomčík P.: *Int. J. Mol. Sci.* submitted (2023).

1P03
STUDIUM VOLTAMETRICKÉHO CHOVÁNÍ 7B-HYDROXYCHOLESTEROLU NA ELEKTRODĚ Z BOREM DOPOVANÉHO DIAMANTU

Eva Bláhová[1], Lucie Serbanová, Karolina Schwarzová-Pecková[1]

[1]*Univerzita Karlova, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Albertov 6, 12800 Praha 2, blahovaev@natur.cuni.cz*

Oxysteroly jsou důležité látky ovlivňující řadu dějů v lidském těle. Jsou součástí mechanismu odbourání sterolů na žlučové kyseliny, podílejí se na homeostázi cholesterolu, jedná se ale i o látky účastnící se řady patogenezí. Detekce oxysterolů je poměrně komplikovaná, zároveň však důležitá, jelikož mohou být markery celé řady onemocnění. Metody užívané k detekci patří mezi pokročilé instrumentální metody, např. plynová či kapalinová chromatografie ve spojení s hmotnostním detektorem [1, 2].

Elektrochemické metody byly dosud k detekci oxysterolů využity okrajově. Stejně jako ostatní steroidní sloučeniny neobsahující aromatický kruh nebo konjugované dvojné vazby se dají oxidovat pouze při vysoce kladných potenciálech v nevodných prostředích. Inovativním přístupem pro elektrochemickou detekci steroidních sloučenin je jejich aktivace díky dehydrataci steroidního skeletu, která vede k zavedení dvojných vazeb a případně dalším strukturním změnám umožňujícím následnou elektrochemickou oxidaci vzniklých produktů v rámci potenciálového okna běžných nemodifikovaných elektrod [3].

V této práci byla studována elektrochemická oxidace 7β-hydroxycholesterolu v prostředí kyseliny chloristé v acetonitrilu, kde poskytuje ireverzibilní odezvu při potenciálu okolo +860 mV (vs. Pleskovova referentní elektroda). Byl zkoumán především vliv vody na tuto odezvu a nalezení optimálních podmínek k zajištění stability signálu pro provedení dalších experimentů, tedy měření závislosti odezvy na rychlosti polarizace a proměření kalibračních závislostí.

Tento výzkum vznikl za podpory Grantové agentury Univerzity Karlovy (projekt GAUK 172823) a specifického vysokoškolského výzkumu (SVV 260690).

[1] Otaegui-Arrazola A., Menéndez-Carreño M., Ansorena D., Astiasarán I.: *Food Chem. Toxicol. 48*, 3289 (2010).
[2] Brzeska M., Szymczyk K., Szterk A. J.: *Food Sci. 81*, R2299 (2016).
[3] Klouda J., Barek J., Kočovský P., Herl T., Matysik F.-M., Nesměrák K., Schwarzová-Pecková K.: *Electrochem. Commun. 86*, 99 (2018).

1P04
PERFORMANCE OF DIFFERENT BORON-DOPED DIAMOND SURFACE STATES IN ELECTROCHEMICAL DETECTION OF NEUROTRANSMITTERS IN NEURON CULTIVATION MEDIUM

Anton Lytvynenko[1], Simona Baluchová[1], Jan Krůšek[2], Karolina Schwarzová-Pecková[1]

[1]*Charles University, Faculty of Science, Department of Analytical Chemistry, Albertov 6, 128 00 Prague 2, Czech Republic, lytvynean@natur.cuni.cz*
[2]*Institute of Physiology of the Czech Academy of Sciences, Vídeňská 1083, 142 20 Prague, Czech Republic*

Dopamine and serotonin (5-hydroxytryptamine) are essential neurotransmitters and their malfunctioning is connected to Parkinson's disease, schizophrenia and major depression [1]. The aim was to elaborate an electroanalytical procedure for their detection in neural cells cultivation medium (Neurobasal™), which can assist in studies of such disorders.

The detection was achieved *via* differential pulse voltammetry on boron-doped diamond (BDD) electrodes. The analytical figures of merit were strongly dependent on the state of the BDD surface (anodically oxidized *vs.* polished). The polished BDD surface exhibited faster heterogeneous electron transfer (HET) kinetics, sharper peaks and therefore higher sensitivity, resulting in limit of detection (LoD) values of 0.2 µM for serotonin and 2.0 µM for dopamine. On the oxidized surface, LoD values were *ca.* 2 times higher, which corresponded to poorer shaped peaks and more sluggish HET kinetics. However, manual polishing led to poorer repeatability of the voltammograms (in particular with an increase in concentration of the analytes), which could be explained by superior reproducibility of the electrochemical treatment. For both surface states, serotonin caused more severe electrode fouling limiting the linear dynamic range at higher concentrations.

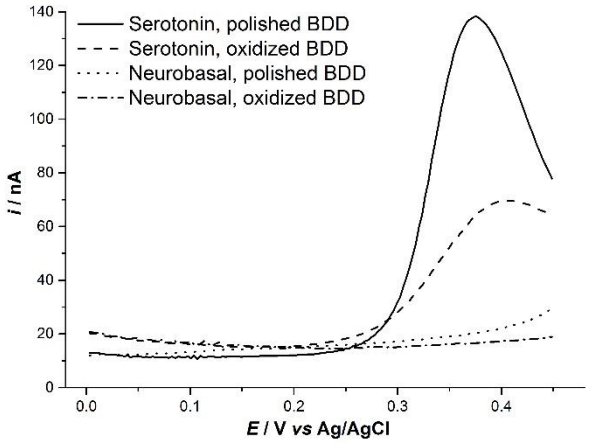


Fig. 1 Differential pulse voltammograms of 6 µM serotonin and Neurobasal medium.

The authors thank to Ms. A. Eremina (Charles University, Faculty of Science, Department of Analytical Chemistry) who performed auxiliary electrochemical measurements. The work was partially funded by Czech Science Foundation (project GAČR 23-05688S). Anton Lytvynenko also acknowledges the support of JUNIOR Fund of Charles University partially covering his research stay at Charles University.

[1] Nakamura S.: Front. Biosci. (Schol Ed) 14, 4 (2022).

1P05
FLOW TECHNIQUES FOR SAMPLE PRETREATMENT

Petr Solich[1], Burkhard Horstkotte[1], Hana Sklenářová[1], Petr Chocholouš[1], Dalibor Šatínský[1]

[1]*Laboratory of Flow analysis, Department of Analytical Chemistry, Faculty of Pharmacy, Charles University, 50005 Hradec Králové, Czech Republic, solich@faf.cuni.cz*

In the last decade, sample preparation has become of great interest to an increasing number of scientists. To automate different extraction procedures, flow techniques as highly versatile tools, above all Sequential Injection Analysis (SIA), and applying the principles of flow methods on other platforms, have been the main approaches used for this task. In this field, various extraction methodologies have been developed based on liquid-liquid extraction. Sample pretreatment using solid phase extraction have been automated in SIA systems with sorbents used in the form of prepacked micro-columns. Lately, 3D printing technology was used to develop new flow system components including devices that allow easy and robust handling of polymer nanofibers as novel sorbents for solid phase extraction. Head-space extraction was also developed in the single-drop format for the analysis of volatile analytes using a second SIA-related approach Lab-in-syringe [1]. All these sample pretreatment methods can be used in combination with on-line determination using the same flow system or hyphenated with chromatographic systems [2]. Examples will be discussed to demonstrate how flow techniques can improve the sample pretreatment step.

This work was supported by the STARSS project co-funded by ERDF (Reg. No. CZ.02.1.01/0.0/0.0/15_003/0000465).

[1] Horstkotte B., Solich P.: *Molecules* 25, 1612 (2020).
[2] Šrámková I., Horstkotte B., Sklenářová H., Solich P., Kolev S.D.: *Anal. Chim. Acta* 934, 132 (2016).

1P06
VSÁDOVÁ INJEKČNÍ ANALÝZA

Jiří Barek

Univerzita Karlova, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Albertov 5, CZ 12843 Praha 2, Barek@natur.cuni.cz

Velkoplošné monitorování biologicky aktivních organických látek v různých environmentálních a biologických matricích patří k nejvýznamnějším úkolům moderní analytické chemie [1]. Mezi novější analytické metody s obrovským potenciálem v této oblasti patří nepochybně vsádková injekční analýza [2], kterou kde možno nepochybně možno použít ke stanovení statisíců elektrochemicky aktivních organických látek při mimořádně nízkých pořizovacích i provozních nákladech, dostatečné selektivitě a citlivosti a schopnosti měření v terénu [3].

V tomto příspěvku bude pozornost zaměřena zejména na spojení této užitečné techniky s využitím různých elektrodových materiálů intenzivně studovaných v naší laboratoři (amalgámové elektrody, borem dopované diamantové filmové elektrody, bizmutové elektrody, sítotiskové elektrody, naprašované kovové elektrody, chemicky či biochemicky modifikované elektrody atp.)

Děkujeme vedení Katedry analytické chemie PřF UK za podporu všech aktivit UNESCO laboratoře elektrochemie životního prostředí.

[1] Barek J.: Chemosensors, *9*, 12 (2021).
[2] Dvořák P., Vyskočil V.: *Chem. Listy, 113,* 703 (2019).
[3] Rocha D.P., Cardoso R.M., Tormin T.F., et al.: *Electroanalysis, 30,* 1386 (2018).

1P07
VSÁDZKOVÁ INJEKČNÁ ANALÝZA AKO ÚČINNÝ ANALYTICKÝ PROSTRIEDOK VO FARMACEUTICKEJ PRAXI

Marek Haššo, Adela Kekeľáková, Gabriela Kováčiková, 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

Vývoj analytických metód, poskytujúcich presné, správne a rýchle výsledky analýz je v nemalej miere ovplyvňovaný aj možnosťami automa–tizácie procesu analýzy, s cieľom zamedziť vzniku chýb zo strany obsluhujúceho pracovníka ako aj skrátiť celkový čas analýzy. Ďalším dôležitým parametrom je miniaturizácia prístrojového vybavenia, množstva použitých chemikálii a objemu analyzovaných vzoriek, čo je v súlade s princípmi „*zelenej analytickej chémie*“. Dosiahnutie týchto parametrov podnietilo vývoj tzv. automatizovaných analytických systémov ako sú prietoková injekčná analýza (FIA), sekvenčná injekčná analýza (SIA) a vsádzková injekčná analýza (BIA) [1, 2]. Práve BIA umožňuje dosiahnuť rýchle, presné a správne výsledky analýzy za spotreby malého množstva analyzovanej vzorky, eliminuje potrebu nosného média, ktoré sprostredkúva pohyb analyzovanej vzorky do reakčnej cely a detektoru ako je tomu v prípade FIA. Ďalšou výhodou BIA oproti realizácii experimentu v stacionárnom systéme je analýza veľkého počtu vzoriek v krátkom časovom horizonte, zlepšenie opakovateľnosti zaznamenaných analytických signálov a urýchlenie celkového procesu vývoja analy–tickej metódy a jej optimalizácie a validácie [3]. Príspevok sa zameriava na optimalizáciu experimentálnych parametrov pri vývoji a validácii novej analytickej metódy využívajúcej spojenie BIA s adsorptívnou štvorcovovlnovou rozpúšťacou analýzou na stanovenie vybraného liečiva - diazepamu vo vzorkách farmaceutických preparátov.

Autori ďakujú za podporu VEGA MŠVVaŠ SR a SAV (projekty č. 1/0159/20 a 1/0017/23) a bilaterálnemu APVV projektu Slovensko – Srbsko (SK-SRB-21-0019).

[1] Haššo M., Švorc Ľ.: *Monatsh. Chem.* 153, 11 (2022).
[2] Riberio M. M. A. C., Rocha R. G., Munoz R. A. A., Richter E. M.: *Electroanalysis.* 33, 1 (2020).
[3] Haššo M., Matúšková I., Švorc Ľ., *J Food Compost Anal.* 115, 11 (2022).

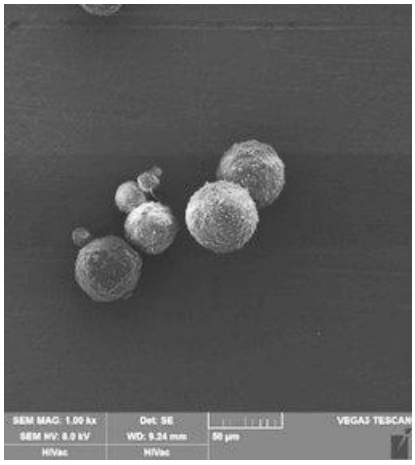
1P08
KATECHOLÁZOVÁ AKTIVITA KOMPLEXŮ MĚDI: V ROZTOKU VS. NA POVRCHU ČÁSTIC

Michaela Bártová[1], Tomáš Mikysek[1]

[1]*Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Katedra analytické chemie, Studentská 573, 532 10 Pardubice, michaela.bartova@student.upce.cz*

Podstatou katecholázové aktivity je schopnost přírodního či umělého enzymu katalyzovat oxidaci katecholů. Přírodním enzymem s touto aktivitou je např. tyrosináza (EC1.14.18.1.), jejíž aktivní centrum obsahuje dva atomy mědi [1]. Umělé enzymy jsou v tomto případě komplexy mědi, které jsou schopné imitovat činnost aktivního centra uvedené tyrosinázy. Lze je rozdělovat dle počtu atomů mědi na jednojaderné a vícejaderné, které jsou tvořeny větším počtem atomů mědi. Jedním z důvodů syntézy biomimetických komplexů mědi je jejich využití pro detekci či stanovení fenolických látek. Tyto tzv. biomimetické senzory jsou stabilnější v porovnání s biosenzory s imobilizovanou tyrosinázou [2].

Tento příspěvek zahrnuje experimenty týkající se stanovení a porovnání katecholázových aktivit čtyř vybraných komplexů mědi. Zejména rozdílná struktura jednotlivých komplexů hraje roli v jejich katalytické činnosti. Kinetická měření popisující katecholázovou aktivitu byla prováděna spektrofotometricky, a to snímáním narůstající absorbance vlivem vznikajícího produktu oxidace substrátu (3,5-di-terc-butylkatecholu). Taktéž je zde popsán možný způsob zakotvení vybraného komplexu na magnetické částice (obr. 1), testování pevnosti samotné vazby a stanovení katecholázové aktivity takto vázaného komplexu. Součástí příspěvku je i charakterizace těchto částic s navázaným komplexem. Tyto základní poznatky mohou pomoci při konstrukci nových typů senzorů.



Obr. 1 Snímek magnetických částic s imobilizovaným komplexem mědi získaný metodou SEM.

Práce byla podpořena Univerzitou Pardubice (projekt č. SGS-2023-001).

[1] Sýs M., Obluková M., Kolivoška V., Sokolová R., Korecká L., Mikysek T.: *J. Electroanal. Chem., 864*, 114066 (2020).
[2] Sýs M., Kocábová J., Klikarová J., Novák M., Jirásko R., Obluková M., Mikysek T., Sokolová R.: *Dalton Transactions. 51*, 13703 (2022).

1P09
METHODS OF RAPID HEAVY METALS DETERMINATION IN WINE SAMPLES

Jarmila Švancarová Laštincová[1]

[1]*Central Control and Testing Institute in Agriculture, Matúškova 21, 833 16 Bratislava, Slovakia, jarmila.lastincova@uksup.sk*

Some heavy metals are indispensable for us in very small quantities of essential minerals like Cu, Cd, Co, Pb, Zn, and Fe. Contamination of wine is not desirable, therefore it is very useful to determine heavy metals by suitable methods.The article presents the heavy metal content in red and white varietal wines in different vintages from south Slovakia with protected designation of origin (PDO) “Južnoslovenská”. The white wine variety “Rizling vlašský” vintage 2007, as well as the red variety “Frankovka modrá” vintage 2007 was determined by „Atomic Absorption Spectrometry“. The amounts of Pb were found at 59 µg.dm^{-3} and 73 µg.dm^{-3} respectively. The Cd content was 1.60 µg.dm^{-3} and 1.79 µg.dm^{-3} respectively and the content of Cu was 183µg.dm^{-3} and 262µg.dm^{-3} respectively.

After 13 years the white wine variety “Rizling rýnsky” vintage 2020 from the same PDO “Južnoslovenská” was tested and determination by electrothermal-AAS of metals Pb, Cu, and Fe were done and metal amounts were 10 µg.dm^{-3}, 220 µg.dm^{-3} and 390 µg.dm^{-3} respectively. In the red wine variety “Frankovka modrá” vintage 2020 was determined by ETA-AAS with another modificator 66 µg.dm^{-3} Pb, 420 µg.dm^{-3} Fe and 195 µg.dm^{-3} Cu.This study aimed to examine whether the wines in different vintage vary according to the content of heavy metals. Data analysis showed no statistically significant differences and no contamination was found.

1P10
SYNTHESIS AND ANALYTICAL APPLICATIONS OF CdTe-QD’S NANOPARTICLES

Ivan Landry Yumdjo Youmbissi, Petra Humajová, Patrik Baliak, Alžběta Jebavá, Lenka Řezáčová, Přemysl Lubal

Department of Chemistry, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Kamenice 5, 625 00 Brno, ČR, 493489@mail.muni.cz

The recent nanotechnological methods enable the assembly and characterization of well-defined objects in nanometer scale. The quantum-dot (QD) colloid particles of diameter 1-10 nm are usually low-soluble CdTe compounds and their solubility is increased by surface covering of thiol containing compounds and also by increase of solution pH which leads to dissociation of functional carboxylate and/or protonated amine groups. Their exceptional physico-chemical and optical properties as well as higher photostability compared to organic fluorophores can be used for development of new analytical methods for the detection and determination of ions and molecules important in biology and medicine. QD-based nanoparticles exhibit broad excitation and narrow emission band where their position depends on their kind, morphology and size and thus the maximum of emission band can be tuned by synthetic process.

This contribution deals with synthesis and characterization of various QD-CdTe nanoparticles covered by thiol containing compounds (*e.g.* mercaptopropionic acid, dimercaptosuccinic acid, glutathione, cysteine, 2-mercapto-ethanesulfonic acid *etc.*). The physico-chemical processes of nanoparticles in presence of Cu(II) and Pb(II) ions were studied and some of them were employed for their analytical determination by means of luminescence spectroscopy. The analytical procedure was optimized for experimental conditions (*e.g.* pH,

concentration of nanoparticles and analyte) and then it was utilized for determination of both metal ions in water samples. The proposed simple and fast method can be employed for environmental analysis.

Tato práce vznikla za podpory grantu Masarykovy univerzity (MUNI/A/1421/2022), MŠMT ČR (LTC20044) a EU programu (COST CA18202 Nectar Action).

1P11
ADVANCED SELECTIVE MATERIALS AS ADSORBENTS FOR SAMPLE PREPARATION EXTRACTION TECHNIQUES AND HPLC ANALYSIS OF BIOACTIVE COMPOUNDS

Katarína Hroboňová[1], Andrea Špačková[1], Jana Sádecká[1]

[1]*Slovak 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*

Sample preparation is an important step in the process of chemical analysis for determination of compounds (e.g. using chromatographic methods). Analytical protocols include traditional and advanced extraction techniques, among which extractions using solid adsorbents are also represented. The use of advanced selective materials as adsorbents in sample pre-treatment techniques is currently being introduced into the methods. The objective of the contribution is to introduce adsorption material, molecularly imprinted polymers (MIP), that are more selective, easily prepared, and can improve efficiency and selectivity of conventional methods. MIPs have shown great potential in extractions and separations. The examples of applications these advanced materials as adsorbents in solid phase extraction of complex samples, such as natural plant materials, foods, personal care products, before their HPLC analysis will be presented in contribution. Various imprinting and characterization techniques were used for fabrication and evaluation of MIPs, resulting in adsorbents with desired properties applicable in several extraction formats, such as SPE in cartridges, miniaturized SPE (e.g. pipette-tip SPE), magnetic extraction, and separation of enantiomers. The application of MIP in extraction methods is advanced also due to their reusability, reducing analysis time and solvents [1, 2].

This work was supported by the Scientific Grant Agency VEGA of the Slovak Republic (grant number 1/0159/20).

[1] Hroboňová K., Vybohová V., Lomenova A., Špačková A., Svitková V.: *Monatshefte für Chemie - Chemical Monthly 153*, 1037 (2022).
[2] Špačková A., Hroboňová K.: *Chem. Listy* 117, 290 (2023).

1P12
DEVELOPMENT OF MOLECULARLY IMPRINTED POLYMER AND ITS MAGNETIC VERSION FOR THE EXTRACTION OF PANTHENOL FROM PERSONAL CARE PRODUCTS

Andrea Špačková[1], Katarína Hroboňová[1]

[1]*Slovak University of Technology in Bratislava, Faculty of Chemical and Food Technology, Institute of Analytical Chemistry, Radlinského 9, 812 37, Bratislava, Slovakia, andrea.spackova@stuba.sk*

HPLC analysis of complex samples such as creams and body lotions mostly require sample preparation for analyte isolation. Traditional procedures include liquid-liquid extraction (LLE) followed by purification and/or concentration of analyte using solid phase extraction (SPE) on conventional adsorbents (e.g. C18, ionex). Their disadvantages are low selectivity, organic solvent consuming, multiple steps which takes a lot of time and environmentally unfriendly character. To improve the selectivity to the target analytes, molecularly imprinted polymer (MIP) as sorbents in SPE was developed. MIP-based SPE is realized mostly in cartridge form, but an alternative is dispersive-SPE with magnetic MIP. These approaches were applied in the analysis of personal care products for the determination of panthenol. This work is focused on preparation and characterization of MIP and its magnetics version MMIP (imprinted polymers on the surface of magnetic particles). MIPs and MMIPs fabricated with 4-vinylpyridine as monomer and methanol as porogen, were tested as SPE adsorbents for extraction of panthenol from milk-type of personal care products. The extracts were analyzed by HPLC-DAD method. Proposed MIP-based procedures were compared with traditional LLE followed by SPE [1-3].

This work was supported by Slovak Research and Development Agency under contract number VEGA 1/0159/20 and the Project of Young researcher at FCHPT STU in Bratislava (Preparation, evaluation of some properties and application of polymer sorbents in the analysis of cosmetic product).

[1] Celeiro M., Garcia-Jares C., Llompart M., Lores M.: *Molecules. 26*, 4900 (2021).
[2] Hroboňová K., Špačková A.: *Acta Chim. Slovaca. 13*, 56 (2020).
[3] Huang S., Xu J., Zheng J., Zhu F., Xie L., Ouyang G.: *Anal. Bioanal. Chem. 410*, 3991 (2018).

1P13
GLYCOPEPTIDE ENRICHMENT ON POLAR STATIONARY PHASES IN HYDROPHILIC INTERACTION LIQUID CHROMATOGRAPHY MODE

Katarína Molnárová[1], Petr Kozlík[1]

[1]*Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Albertov 2038/6, 128 00 Nové Město, 812 15 Praha, katarina.molnarova@natur.cuni.cz*

The glycopeptide analysis is a challenging task mainly due to the glycan macro- and microheterogeneity, their low ionization efficiency and abundance in complex samples [1]. To overcome these limitations, enrichment methods have been introduced to glycoproteomic analysis. Due to the polar character of the glycopeptides, solid phase extraction (SPE) on polar stationary phases in hydrophilic interaction liquid chromatography mode (HILIC) is a promising technique, which provides high selectivity towards glycosylated peptides. In this work, we studied the influence of the experimental conditions for the enrichment of human immunoglobulin G glycopeptides using SPE-HILIC. The enrichment was carried out on an unmodified-silicagel stationary phase, while different elution solvents (acetonitrile, isopropanol, and methanol) were tested to achieve the best enrichment efficiency. Among the tested solvents, acetonitrile provided the best results of the enrichment. We tested different concentrations of acetonitrile during the elution and conditioning steps. At last, a sample of human plasma was prepared and enriched by SPE-HILIC. We observed that the abundance of non-glycosylated peptides successfully decreased after the enrichment. Our results showed that tuning the experimental conditions during the enrichment step is an essential step in glycoproteomic analysis.

This work has been supported by the Grant Agency of Charles University, project No 336421.

[1] PatwaT., Li C., Simeone D. M., Lubman D. M.: *Mass Spectrometry Reviews*. 29, 5, (2010).

1P14
STRUKTURA DNA NA ELEKTRODÁCH: MOŽNÁ ÚSKALÍ A CESTY K JEJICH PŘEKONÁNÍ

Miroslav Fojta[1], Hana Pivoňková[1], Luděk Havran[1], Daniel Dobrovodský[1], Monika Hermanová[1]

[1]*Biofyzikální ústav AV ČR, v.v.i., Královopolská 135, CZ-612 00, Brno, Česká republika, fojta@ibp.cz*

Elektrochemické metody se osvědčily jako vynikající analytické nástroje v oblasti studia nukleových kyselin, včetně charakterizace jejich struktury – například monitorování denaturace dvouřetězcové DNA v roztoku a na elektrodách, detekce zlomů a jiných poškození, nebo konformačních změn spojených s přítomností superhelikálního vinutí [1]. Obecně lze říci, že strukturu DNA je možno elektrochemicky studovat s vysokou spolehlivostí na základě měření vlastních redukčních, oxidačních nebo tensametrických signálů bází, pokud pracujeme s relativně dlouhými molekulami DNA o průměrné nukleotidové sekvenci a je naším cílem rozlišit dvouřetězcovou a jednořetězcovou DNA. Při studiu alternativních struktur DNA, jako jsou např. guaninové [2] nebo cytosinové kvadruplexy, však vstupují do hry další faktory, jako je asymetrie v nukleotidovém složení jednotlivých řetězců ovlivňující jejich interakce s povrchem elektrody, repetitivní charakter zkoumaných molekul a závislost elektrochemických signálů určitých bází (např. guaninu) na přítomnosti jiných bází. Kvůli těmto jevům není vždy jednoduché rozhodnout, zda dané strukturní uspořádání detekované nezávislou metodou v roztoku existuje i v adsorbovaném stavu na povrchu elektrody. K překonání těchto obtíží mohou být využity alternativní nepřímé metody, např. využití elektroaktivních sond k vyhodnocení kompaktnosti adsorbovaných vrstev DNA na elektrodách [3] nebo metoda založená na sledování rozdílů rychlosti hybridizaci DNA na grafitové elektrodě za podmínek stabilizace a destabilizace svinuté sekundární struktury.

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky (grant č. 23-05688S).

[1] Palecek E., Bartosik M.: *Chem. Rev*. 112, 3427 (2012).
[2] Vidlakova P., Pivonkova H., Kejnovska I., Trnkova L., Vorlickova M., Fojta M., Havran L.: *Anal. Bioanal. Chem.* 407, 5817 (2015).
[3] Dobrovodsky D., Danhel A., Mothes-Martin E., Pratviel G., Renciuk D., Fojta M.: *Electrochim. Acta* 442, 141878 (2023).

1P15
KOMPLEXY DNA OLIGONUKLEOTIDŮ A SLOŽEK DNA S IONTY RTUTI

Monika Hermanová[1], Marcela Hrušková[1,2], Luděk Havran[1], Miroslav Fojta[1]

[1]*Biofyzikální ústav AV ČR, v.v.i., Královopolská 135, 612 00, Brno, Česká republika, hermanova@ibp.cz*
[2]*Přírodovědecká fakulta, Masarykova Univerzita, Kotlářská 267/2, 602 00 Brno, Česká republika*

Kromě přirozeného způsobu párování nukleobází prostřednictvím vodíkových můstků [1] byla popsána i možnost tvorby párů bází prostřednictvím iontů přechodných kovů, přičemž nejlépe popsaným typem je tvorba komplexů thyminu se rtutí, kdy je atom rtuti vázán mezi atomy dusíku v poloze 3 obou thyminových zbytků [2]. Této interakce a následné tvorby sekundárních struktur DNA je hojně využíváno při konstrukci senzorů pro detekci rtuti [3]. Schopnost složek nukleových kyselin i DNA oligonukleotidů tvořit komplexy s ionty rtuti lze sledovat i pomocí elektrochemických metod a visící rtuťové kapkové elektrody (HMDE), čehož bylo využito v této práci. Interakce se rtutí byla pomocí tohoto přístupu studována - kromě přirozených složek DNA - i u některých modifi–kovaných bází, konkrétně thiopyrimidinů, což jsou pyrimidinové báze, kde byl některý atom kyslíku nahrazen atomem síry. Získané výsledky ukazují schopnost tvorby komplexů se rtutí jak pro již popsaný thymin, kdy nejvýraznější signály byly pozorovány u thyminu ve formě homooligonukleotidu dT_{30}, tak i pro guanin ve formě nukleosid trifosfátu. Signály komplexů bází se rtutí byly podle očekávání pozorovány i u vybraných thiopyrimidinů.

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky (grant č. 21-46325L).

[1] Hason S., Pivonkova H., Vetterl V., Fojta M.: *Anal Chem* 80, 2391 (2008).
[2] Liu G. F., Li Z. W., Zhu J. F., Liu Y., Zhou Y., He J. L.: *New J Chem 39*, 8752 (2015).
[3] Sahin S., Caglayana M. O., Üstünda Z.: *Talanta* 220, 121437 (2020).

1P16
VÝVOJ CITLIVÉHO A SELEKTÍVNEHO ELEKTROCHEMICKÉHO BIOSENZORA PRE DETEKCIU VIROIDOV (CBCVD)

Ondrej Hesko[1], Monika Hermanová[1], Alnilan Cristina Barros Lobato[2], Miroslav Fojta[1]

[1]*Biofyzikální ústav AV ČR, v.v.i., Královopolská 135, 612 00 Brno, Czech Republic, hesko@ibp.cz*
[2]*Department of Analytical Chemistry, National Institute of Chemistry, Hajdrihova 19, Ljubljana, Slovenia*

Citrus bark cracking viroid (CBCVd) je RNA viroid, ktorý okrem citrusov napáda aj rastliny chmeľu a znižuje jeho výnosy. Pre účinné riadenie a obmedzenie šírenia viroidaa a minimalizáciu škôd spôsobených takýmito infekciami je nevyhnutné neustále a účinne monitorovať ich možnú prítomnosť. Okrem konvenčných techník na detekciu viroidovej RNA za využitia elektroforézy v polyakrylamidovom géle, ako aj metód založených na amplifikácii (PCR, RT-LAMP), sekvenácii a hybridizácii viroidovej RNA (northern-blot) [1], elektrochémia ponúka alternatívnu metódu citlivého, rýchleho, lacného a senzitívneho senzora.

Elektrochemické metódy na detekciu špecifickej sekvencie DNA/RNA sa väčšinou spoliehajú na detekciu signálu pomocou inkorporovanej redoxne-aktívnej značky alebo pomocou biokonjugovateľnej značky (modifikácia biotínom) spojenou s enzýmovým detekčným systémom (enzým konjugovaný so streptavidínom). Keďže analytom je viroidová RNA, je potrebné použiť reverznú transkripciu na premenu RNA na komplementárnu cDNA. Technika spočíva v inkorporácii biotínom označených nukleotidov počas PCR/LAMP amplifikácie alebo pomocou metódy predlžovania priméra (PEX), nasledovaná adsorpciou biotínom označených produktov na elektródu z pyrolitického grafitu (PGE) a pripojením enzýmu streptavidín-alkalickej fosfatázy. Následne je generovaný elektroaktívny indikátor enzymatickou reakciou z neaktívneho substrátu (1-naphtol je uvoľnený z jeho fosfoesteru), ktorý je detekovaný elektrochemicky [2].

Prezentované techniky môžu rozšíriť využitie elektrochémie na PGE v rámci analýzy a detekcie špecifickej sekvencie DNA/RNA (viroidu CBCVd) a pri vývoji nových biosenzorov.

Tato práca vznikla za finančnej podpory Grantovej agentúry Českej republiky (projekt č.21-46325L).

[1] X. Nie, R.P. Singh, Viroids and Satellites, Elsevier, 2017: pp. 347–356.
[2] L. Hároníková, J. Špaček, et al., Monatshefte Für Chemie - Chemical Monthly. 146 (2015) 849–855.

1P17
SWOT ANALÝZA ELIMINAČNÍ VOLTAMETRIE S LINEÁRNÍM SCANEM

Tomáš Navrátil[1], Jana Skopalová[2], Vojtěch Hrdlička[1], Xiaochun Li[3], Libuše Trnková[3]

[1]Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., Dolejškova 3, 182 00 Praha 8, Česká Republika, tomas.navratil@jh-inst.cas.cz
[2]Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, 17. listopadu 1192/12, 771 46 Olomouc, Česká Republika
[3]Masarykova univerzita, Přírodovědecká fakulta, Ústav chemie, Kamenice 753/5, 625 00 Brno, Česká republika

Eliminační voltametrie s lineárním scanem (EVLS) představuje již téměř tradiční matematicko-voltametrickou metodu získávání podrobnějších informací o registrovaných elektrochemických signálech, jež mohou přispět k lepšímu porozumění analyzovaných systémů [1, 2]. Ve WOS lze najít téměř sto publikací, které se zabývají vývojem či aplikací eliminačních metod (při 1500 citacích). Po více než čtvrtstoletí existence EVLS je již možno provést SWOT analýzu, tj. shrnout její silné stránky (např. striktně teoretické základy, možnost eliminovat, zachovat nebo kombinovat příspěvky jednotlivých proudů – nabíjecího, difúzního, kinetického, ireverzibilního; možnost objasnit mechanismus elektrodových procesů, rozšířit potenciálové okno, separovat překrývající se signály, stanovit součin koeficientu přenosu náboje a počtu elektronů, rozlišit reakci látky v adsorbovaném stavu [3] nebo předřazenou chemickou reakci, potlačit matriční efekty; široké použití v anorganické, organické, molekulární, farmaceutické, analytické chemii [3], toxikologii i biochemii), slabé stránky (hlavní předpoklad, že registrovaný voltametrický proud je prostým součtem jednotlivých příspěvků, není vždy splněn; k výpočtům je potřeba registrovat více voltamogramů v poměrně širokém rozsahu rychlostí scanu a za stejných počátečních experimentálních podmínek pro všechny rychlosti), příležitosti (např. snadná imple–mentace výpočetních procedur do vyhodnoco–vacího softwaru, slibné směry rozvoje) a hrozby (např. neochota výrobců zabudovat EVLS do vyhodnocovacího softwaru, nedostatečné rozšíření teorie EVLS mezi elektrochemiky, EVLS není předmětem výuky na vysokých školách).

Tento výzkum byl podpořen Ústavem fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i. (projekt č. 997123), Grantovou agenturou ČR (projekt č. GAČR 20-01589S) a Masarykovou univerzitou (MUNI/A/1539/2021 a MUNI/A/1421/2022).

[1] Dracka O.: *J. Electroanal. Chem. 402*, 19 (1996).
[2] Trnkova L.: *J. Electroanal. Chem. 905*, 115961 (2022).
[3] Skopalova J., Navratil T.: *Chem. Anal.-Warsaw* 52, 961 (2007).

1P18
NETRADIČNÍ SPOJENÍ ELEKTROCHEMIE S HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIÍ: ANALÝZA ELEKTROLYTICKÝCH PRODUKTŮ ADSORBOVANÝCH NA ELEKTRODĚ

Jana Skopalová, Radek Jerga, Petra Krejčí, Petr Bednář, Petr Barták

Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, 17. listopadu 1192/12, 779 00 Olomouc, Česká republika, jana.skopalova@upol.cz

Elektrochemie se kromě rozsáhlého využití v oblasti měření fyzikálně-chemických veličin a analýzy elektrochemicky aktivních látek používá stále častěji k elektro-syntetickým účelům a také ke studiu mechanismů redoxních a metabolických přeměn biologicky aktivních látek, jako jsou léčiva, pesticidy a xenobiotika obecně. Pro analýzu produktů redoxních reakcí lze použít celou řadu analytických přístupů. Reakční produkty v roztoku se nejčastěji analyzují metodami chromatografickými a/nebo spektrálními. Sledování vzniku reaktivních meziproduktů či produktů umožňují on-line spojení elektrochemie s IČ, UV-vis, Ramanovou [1] nebo hmotnostní spektrometrií [2].

Některé biologicky významné látky tvoří reaktivní meziprodukty podléhající následným reakcím za tvorby oligomerních produktů, které zůstávají adsorbovány na povrchu pracovní elektrody a jsou obtížně detekovatelné v roztoku. Pro analýzu takových látek byla zkonstruována speciální elektroda ze svazku uhlíkových vláken (uhlíková štětičková elektroda, CFBE), kterou lze použít jako sondu pro hmotnostně spektrometrickou analýzu pevných látek za atmosférického tlaku (ASAP-MS) [3]. CFBE s naadsorbovanými elektrochemicky generova–nými produkty se vloží do iontového zdroje, v němž jsou látky z jejího

povrchu tepelně desorbovány, ionizovány v korónovém výboji a následně analyzovány hmotnostní spektrometrií. Praktické využití CFBE bude ilustrováno na příkladech analýzy produktů elektrochemické oxidace polybromovaných fenolů (tribromfenolu a pentabromfenolu) a heterocyklů s *N*-fenylovým motivem, který je součástí skupiny látek zneužívaných jako pouliční drogy.

Tato práce vznikla za podpory Univerzity Palackého v Olomouci (projekt IGA_PrF_2023_027) a Grantové agentury České republiky (projekt 20-07350S).

[1] Ibanez D., Garoz-Ruiz J., Heras A., Colina A.: *Anal. Chem. 88*, 8210 (2016).
[2] Portychová L., Schug K.A.: *Anal. Chim. Acta 993*, 1 (2017).
[3] Skopalová J., Barták P., Bednář P., Tomková H., Ingr T., Lorencová I., Kučerová P., Papoušek R., Lemr K.: *Anal. Chim. Acta 999*, 60 (1018).

1P19
IS BIOCHAR A RELIABLE SUBSTITUTE FOR CARBON BLACK IN ELECTROCHEMICAL SENSING?

Olha Sarakhman[1], Pavol Gemeiner[2], Michal Hatala[2], Vlastimil Vyskočil[3], Jiří Barek[3], Ján Labuda[1], Ľubomír Švorc[1]

[1]*Slovak 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*
[2]*Slovak University of Technology in Bratislava, Faculty of Chemical and Food Technology, Department of Graphic Arts Technology and Applied Photochemistry, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia*
[3]*Charles University, Faculty of Science, Department of Analytical Chemistry, UNESCO Laboratory of Environmental Electrochemistry, Hlavova 2030/8, 128 43, Prague 2, Czech Republic*

The search for new scientific methodologies and eco-friendly as well as low-cost materials is becoming more evident, for example, through the use of renewable materials. In this study, we have investigated the use of biomass as a green alternative to the carbon black material for the fabrication of cost-effective, disposable and portable electrochemical sensors [1, 2]. The bulk approach has been adopted for constructing the screen-printed sensors with various mutual ratios of biochar (BIO) and carbon black (CB): (BIO:CB = 0:100; BIO:CB = 25:75; BIO:CB = 50:50; BIO:CB = 75:25; BIO:CB = 100:0). Detailed characterization of the fabricated sensors was carried out by scanning electron microscopy, Raman spectroscopy, and electrochemistry by performing cyclic voltammetric (CV) experiments with "outer-sphere" (cationic $[Ru(NH_3)_6]^{3+/2+}$ and anionic $[IrCl_6]^{2-/3-}$) or "inner-sphere" (anionic $[Fe(CN)_6]^{3-/4-}$) redox indicators. Afterwards, the performance of sensors for the voltammetric sensing of model analytes has been assessed. The special attention has been paid to investigation and comparison of main analytical features (sensitivity, linear dynamic range, limit of detection) and method validation. The results of this study will extend the knowledge in the design of electrochemical (bio)sensors, highlighting current trends and possible practical challenges in their realisation and application.

This work has been supported by Grant Agency of the Slovak Republic (VEGA No. 1/0159/20 and 1/0017/23) and project of EU European Structural and Investment Funds: Operational Programme Research, Development and Education (CZ.02.2.69/0.0/0.0/18_053/0016976).

[1] Kalinke C., de Oliveira P. R., Bonacin J. A., et al.: *Green Chem. 23*, 5272 (2021).
[2] Spanu D., Binda G., Dossi C., Monticelli D.: *Microchem. J. 159*, 105506 (2020).

1P20
CHEMICKÝ OTISK JAKO NÁSTROJ PRO URČENÍ PROVENIENCE RADIOLARITOVÝCH ARTEFAKTŮ

Tomáš Pluháček[1], Martin Moník[2], Zdeňka Nerudová[3], Jitka Součková[1], Filip Gregar[1], Adéla Mikulová[1]

[1]*Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, tomas.pluhacek@upol.cz*
[2]*Katedra geologie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc*
[3]*Moravské zemské muzeum, Zelný trh 6, 659 37 Brno*

Radiolarity, křemité horniny s podstatným zastoupením mřížovců (radiolarií) mezi mikrofosiliemi, byly v době kamenné využívané k výrobě nástrojů či jiných artefaktů v celé střední Evropě. Dané artefakty lze tak mj. využít ke studiu mobility populací a jejích změn v mladopaleolitických kulturách aurignacienu (ca 42-30 tisíc let BP) a gravettienu (ca 33-24 tisíc let BP) [1]. Vzhledem k rozličnosti optických, petrofyzikálních a chemických vlastností radiolaritů je pro rozlišení jejich provenience nutné uplatnit multimodální přístup. Náš výzkum testoval možnost rozlišení radiolaritů z šesti různých oblastí střední Evropy

(1. Severní vápencové Alpy, 2. bradlové pásmo Západních Karpat v okolí Vídně, 3. západní Slovensko, 4. polské Pieniny, 5. oblast pod Pálavskými vrchy, 6. pohoří Gerecse), přičemž bylo využito kombinace měření barvy pomocí spektrofotometrie a prvkové analýzy pomocí rentgenové fluorescence (XRF) a spojení laserové ablace s hmotnostní spektrometrií s indukčně vázaným plazmatem (LA-ICP-MS). V rámci přednášky se zaměříme na vývoj, optimalizaci LA-ICP-MS metody pro prvkový screening více než 47 prvků (Li, Be, B, Mg, Ca, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, V, Ni, Cu, Zn, Ga, As, Rb, Sr, Y, Zr, Nb, Mo, Cd, Sn, Sb, Cs, Ba, La, Ce, Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu, Hf, Ta, W, Pb, Bi, Th, U). Pokročilé statistické metody odhalily, že konkrétní provenienci radiolaritů lze určit porovnáním obsahů Ba, Li, B a Sr.

Tento výzkum byl financován z projektu 22-05547S Grantové agentury České republiky.

[1] Brandl, M., Hauzenberger, C., Postl, W., Martinez, M. M., Filzmoser, P., Trnka, G.: *Quaternary International* 351 (2014).

1P21
ELEKTROCHEMICKÁ OXIDÁCIA VYBRANÝCH PERZISTENTNÝCH ZLÚČENÍN A IDENTIFIKÁCIA ICH DEGRADAČNÝCH A TRANSFORMAČNÝCH PRODUKTOV

Lucia Hojová[1], Gabriela Kuchtová[2], Libor Dušek[2], Marian Marton[3], Marian Vojs[3], Andrea Vojs Staňová[1,4]

[1]Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra analytickej chémie, Mlynská Dolina, Ilkovičova 6, 84215, Bratislava 4, hojova4@uniba.sk
[2]Univerzita Pardubice, Chemicko-technologická fakulta, Ústav environmentálneho a chemického inžinierstva, Studentská 573, CZ-532 10, Pardubice, Česká republika
[3]Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta elektrotechniky a informatiky, Ústav elektroniky a fotoniky, Ilkovičova 3, 812 19, Bratislava
[4]Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích, Fakulta rybářství a ochrany vod, Jihočeské výzkumné centrum akvakultury a biodiverzity hydrocenóz, Výzkumný ústav rybářský a hydrobiologický, Zátiší 728/II, CZ-389 25 Vodňany, Česká republika

V súčasnosti je pozorovaný zvyšujúci sa trend zhoršovania kvality vody, ktorý predstavuje vážny celosvetový problém najmä v kontexte klimatických zmien. Medzi hlavné zdroje prispievajúce k ohrozeniu vodných zdrojov patrí upravená a neupravená odpadová voda, poľnohospodárstvo a priemysel [1]. Avšak, za posledné desaťročia sa dosiahol veľký pokrok v oblasti vývoja nových technológii na úpravu a čistenie vôd. Medzi ne patria tiež elektrochemické procesy, ktoré sú alternatívnym riešením pre degradáciu polutantov vrátane vysoko perzistentných [2].

V rámci výskumu sme sa zamerali na elektrochemickú oxidáciu vybraných vysoko perzistentných mikropolutantov (sartanové liečivá, azofarbivá, plastifikátory), ktoré majú nízku účinnosť odbúrania a zároveň vykazujú toxický potenciál. Získané vzorky po elektrochemickej oxidácii boli analyzované s využitím kombinácie kvapalinovej chromatografie a tandemovej hmotnostnej spektrometrie (LC-MS/MS). Pri elektrochemickej oxidácii dochádza k interakcii aktívnych radikálov a pôvodných zlúčenín kontaminantov za vzniku neznámych degradačných a transformačných produktov (DPs a TPs). Vznikajúce DPs a TPs je dôležité spoľahlivo identifikovať, nakoľko môžu byť potenciálne toxické. Pre identifikáciu vznikajúcich DPs a TPs bola využitá kombinácia kvapalinovej chromatografie s vysoko rozlišovacou hmotnostnou spektrometriou (LC-HRMS). Pre každý zo študovaných perzistentných polutantov bola vyhodnotená účinnosť odstránenia a v rámci necielenej analýzy a analýzy očakávaných zlúčenín boli identifikované DPs a TPs.

Predmetná práca vznikla za finančnej podpory Agentúry na podporu výskumu a vývoja (APVV-19-0250) a Grantu Univerzity Komenského (UK/140/2023).

[1] Nováková P., Švecová H., Bořík A., Grabic R.: *Environ Monit Assess*. 195:739 (2023).
[2] Martínez-Huitle A.C., Panizza M.: *Curr Opin Electrochem*. 11, 62-71 (2018).

1P22
VPLYV TRIKLOSANU A STRIEBORNÝCH NANOČASTÍC NA DNA/GCE BIOSENZOR

Jana Blaškovičová

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

Triklosan (TCS) je širokospektrálne antimikrobiálne činidlo, ktoré sa používa v produktoch osobnej hygieny, zdravotnej starostlivosti a klinickej praxi [1]. Jedným z dôležitých aspektov sledovania toxicity látok je

monitorovanie ich vzájomnej interakcie s DNA. V ľudských bunkách TCS spôsobil významné zníženie metylácie DNA [2]. TCS má vplyv na vznik chromozomálnych aberácií, poškodnie DNA a tvorbu zlomov DNA reťazcov. K poškodeniu štruktúry DNA dochádza aj vplyvom produktov degradácie TCS. Strieborné nanočastice (AgNP), podobne ako TCS, majú antimikrobiálne vlastnosti a po expozícii vstupujú do organizmu. Keďže AgNP sa spolu s TCS vyskytovali v produktoch ústnej hygieny, sledoval sa ich vzájomny vplyv na štruktúru DNA pomocou voltampérometrických elektrochemických metód. Testovali sa dve rôzne veľkosti AgNP (asi 15 nm a 37 nm). Elektrochemické správanie TCS bolo sledované na elektróde zo sklovitého uhlíka (GCE), a jeho vplyv na štruktúru DNA ako aj synergický efekt za prítomnosti AgNP sa skúmal na biosenzore s DNA z lososích spermií (DNA/GCE). Na sledovanie množstva zachovanej DNA sa využívali metódy cyklickej voltampérometrie (CV) a štvorcovovlnovej voltampérometrie (SWV). Zistilo sa, že AgNP majú ochranný účinok voči poškodeniu DNA vyvolanému TCS. Najvýraznejší vplyv mali 15 nm AgNP, ktoré za súčasnej prítomnosti TCS zvýšili podiel zachovanej DNA z 55 % na 64 % [3].

Práca bola finančne podporená Vedeckou grantovou agentúrou MŠ SR a SAV (projekt č. 1/0017/23).

[1] Oliver M., Kudlak B., Wieczerzak M., Reis S., Lima S.A.C., Segundo M.A., Miro M.: *Sci. Total Environ. 719*, 137358 (2020).
[2] Ma H., Zheng L., Li Y., Pan S., Hu J., Yu Z., Zhang G., Sheng G., Fu J.: *Chemosphere 90*, 1023–1029 (2013).
[3] Blaškovičová J., Labuda J.: *Sensors 22*, 4332 (2022).

1P23
VALIDACE METODY PRO STANOVENÍ AMINOKYSELIN V PŮDÁCH

Sylvie Kříženecká[1], Veronika Hájková[2], Hana Burdová[1]

[1]*Fakulta životního prostředí, Univerzita Jana Evangelisty Purkyně v Ústí nad Labem, Pasteurova 15, 400 96 Ústí nad Labem, sylvie.krizenecka@ujep.cz*
[2]*Přírodovědecká fakulta, Univerzita Jana Evangelisty Purkyně v Ústí nad Labem, Pasteurova 15, 400 96 Ústí nad Labem*

Kvalita půdy značně určuje výnosy pěstovaných plodin. Součástí této půdy je i malá, ale důležitá část rhizosféra, což je půda v těsné blízkosti kořenů. [1]. V rhizosféře přijímají kořeny rostlin vodu a živiny z půdy a působí na přilehlou půdu prostřednictvím produkovaných kořenových exudátů. Kořenové exudáty obsahují organické kyseliny, sacharidy, aminokyseliny, specializované metabolity, peptidy, proteiny, ureidy a lipidy [2]. Při biotickému a abiotickému stresu může rostlina akumulovat vyšší množství aminokyselin z důvodu příznivých účinků při aklimatizaci na stres. Dále se mohou aminokyseliny hromadit jako zásoba přebytečného dusíku v důsledku poškození buněk.

Stanovení aminokyselin v půdě napomáhá k pochopení reakcí rostlin na stres [3]. Proto je důležité vyvíjet a validovat postupy i analytické metody k jejich preciznímu stanovení. Aminokyseliny se v rhizosféře vyskytují v nízkých koncentracích, proto analytická metoda musí být citlivá a selektivní. K extrakci aminokyselin byla použita různá extrakční činidla (CH_3COONH_4, Na_2SO_4, deionizovaná H_2O a směs methanol + deionizovaná H_2O). Obsah aminokyselin byl stanoven pomocí kapalinové chromatografie s hmotnostním detektorem a to přímým nástřikem na koloně HILIC nebo po derivatizaci pomocí MetAminoKitu na koloně C18. Studie byla provedena na půdě kontaminované naftou.

[1] Ahkami Amir H., Allen White R., Handakumbura P., Jansson Ch.: *Rhizosphere* 3, 233 (2017).
[2] Bobille H., Limami A. M., Robins R., Cukier C., Floch Le G., Fustec L.: *Soil Biology and Biochemistry*, 101, 226 (2016).
[3] Okunev R. V.*: Water, Air, & Soil Pollution* 11, 230 (2019).

PREDNÁŠKY - SEKCIA 2: FYZIKÁLNA CHÉMIA

2P01
ELEKTROCHEMICKÁ STUDIE VYBRANÝCH ACYLGERMANŮ

Vojtěch Bičák[1,2], Alan Liška[1], Jiří Ludvík[1], Michael Haas[3]

[1]*Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., Oddělení molekulární elektrochemie a katalýzy, Dolejškova 3/2155, 18223 Praha, Česko, vojtech.bicak@jh-inst.cas.cz*
[2]*University of Chemistry and Technology Prague, Technická 5, 166 28 Praha, Czechia*
[3]*Institute of Inorganic Chemistry, Technische Universität Graz, Stremayrgasse 9, A-8010 Graz, Austria*

Acylgermany představují relativně novou skupinu látek s nízkou toxicitou pro člověka, která umožňuje použití v dentální medicíně (bílé zubní výplně). Využívá se vlastnosti fotoiniciovat radikálové polymerizace. Tento mechanismus již byl popsán [1].

Fotochemické vlastnosti acylgermanů lze studovat UV-VIS spektroskopií či popsat kvantovými výtěžky. Ke studiu elektronové struktury lze využít také elektrochemické metody [2]. První redukční děj u acylderivátů je zpravidla reverzibilní (termodynamický), což umožňuje korelaci s teoretickými modely.

V rámci příspěvku bude diskutováno elektrochemické chování acylgermanů v základním a excitovaném stavu. Zabývat se budeme: a) mono, di, tri, tetraacylgemany, b) tetraacylsilany, -germany, -stannany, c) di, trinukleárními polyacylgermany (lineární a cyklické struktury), d) halogenderiváty, e) enoláty. Výsledky byly získány pomocí DC-polarografie a cyklické voltametrie v aprotickém prostředí (THF, DMF).

Vliv heteroatomů (Ge, Si, Sn) na výsledné elektrochemické chování není zásadní, jelikož jsou kovalentně vázány ve stabilní struktuře. S rostoucím počtem acylových skupin je první redukční potenciál méně negativní. U vícejaderných acylgemanů hraje velkou roli povaha spojovníku. Alifatický spojovník neumožňuje elektronovou komunikaci mezi vázanými redox centry. U látek s aromatickým spojovníkem byl pozorován největší rozsah komunikace (posun potenciálu) v případě, že obě redox centra byla navázána v *para*-poloze. Halogenderiváty se reduktivně dehalogenují. Enoláty se v dostupném potenciálovém rozsahu neredukují, redukuje se pouze protiion.

Autoři děkují za finanční podporu projektům GAČR 21-23261S, NAWI Graz, RVO: 61388955.
Výpočetní zdroje byly poskytnuty projektem ELIXIR-CZ (ID:90255), část mezinárodní ELIXIR infrastruktury.

[1] Haas M., Radebner J., Eibel A., Gescheidt, G., Stueger, H.: *Chemistry - A European Journal 24*, 8258 (2018).
[2] Frühwirt P., Liška A., Wasdin P.T., Kelterer A.-M., Haas M., Ludvík J., Gescheidt G.: *Organometallics 39*, 2257 (2020).

2P02
METODA SKUPINOVÝCH PŘÍSPĚVKŮ PRO KVALIFIKOVANÉ ODHADY PRVNÍCH REDOXNÍCH POTENCIÁLŮ

Alan Liška[1], Vojtěch Bičák[1,2], Jiří Ludvík[1]

[1]*Oddělení molekulární elektrochemie a katalýzy, Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., Dolejškova 3/2155, 182 23 Praha, ČR, alan.liska@jh-inst.cas.cz*
[2]*Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha, ČR*

K empirickým odhadům elektrochemických potenciálů lze klasicky využít Hammettovy nebo Taftovy rovnice, pokud studovaný systém splňuje strukturní podmínky daného modelu, jsou zároveň známy potřebné konstanty (reakční a substituentové) a referenční potenciál nesubstituovaného derivátu. Díky snadné dostupnosti kvantově chemických výpočtů v současnosti se uvedené postupy spíše než k odhadům redoxních potenciálů neznámých látek používají naopak při vyhodnocování experimentálních výsledků jako kritérium jednotného mechanismu.

Poněvadž standardní redoxní potenciály jsou termodynamické veličiny lineárně korelované se změnami reakční Gibbsovy energie příslušné poloreakce (1), nabízí se myšlenka začít budovat nové schéma pro odhady právě od strukturních příspěvků ke standardní slučovací Gibbsově energii (2).

$$\Delta G^0_r = -nE^0\boldsymbol{F} \quad (1)$$
$$\Delta G^0_r = \Sigma_i(\nu_i \Delta G^0_{f,i}) \quad (2)$$

Způsobů provedení metody skupinových příspěvků při odhadování termodynamických veličin je mnoho. Obvykle se jedná o organické molekuly v plynném stavu [1]. Pokud jde o solvataci, existují možnosti určení hydratačních

termodynamických veličin [2]. U částic ve stavu vodného roztoku lze nejčastěji dohledat pouze hodnoty podmíněných slučovacích Gibbsových energií $\Delta G^{0'}{}_f$ vypočítané z rovnovážných konstant biochemických reakcí [3].

Zatímco dostupnost experimentálních dat pro regresní analýzu je značně omezená, termo–chemické údaje pro libovolnou částici jsou dostupné pomocí teoretických výpočtů. V rámci příspěvku budou diskutovány předběžné výsledky probíhající teoretické studie v kontextu specifik a efektivity jednotlivých kvantově chemických přístupů.

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 21-23261S a interní podpory RVO: 61388955. Výpočetní zdroje byly poskytnuty z projektu (e-INFRA CZ LM2018140) s podporou Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky.

[1] Joback K.G., Reid R.C.: Chemical Engineering Communications 57, 233 (1987).
[2] Cabani S., Gianni P., Mollica V., Lepori L.: J Solution Chem 10, 563 (1981).
[3] Jankowski M.D., Henry C.S., Broadbelt L.J., Hatzimanikatis V.: Biophysical Journal 95(3), 1487 (2008).

2P03
EPR AND UV–VIS–NIR SPECTROELECTROCHEMISTRY OF BIOLOGICALLY ACTIVE COPPER COMPLEXES

Peter Rapta[1]

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

Electrochemical and spectroelectrochemical studies of copper complexes with new thiosemicarbazones were performed and confirmed their redox activity in both the cathodic and the anodic region of potentials [1]. The redox behavior of a variety of metal complexes with biologically active ligands have been studied by cyclic voltammetry, optical spectroscopy, electron paramagnetic resonance (EPR), in situ EPR/UV-visible-NIR spectroelectrochemistry. The one-electron reduction was identified as metal-centered by EPR spectroelectrochemistry. An electro–chemical oxidation pointed out the ligand-centered oxidation, while chemical oxidations of proligands and their complexes afforded several two-electron and four-electron oxidation products, which were isolated and comprehensively characterized. A series of water-soluble salicylaldehyde thiosemi–carbazones with a positively charged trimethyl–ammonium moiety and their Cu(II) complexes were studied concerning their redox activity [2]. The ability of Cu(II) complexes to be reduced by glutathione was investigated in solution by UV-Vis-NIR and EPR spectroscopy. It was confirmed that under the anaerobic conditions at physiological pH, the complexes are reduced to copper(I) species. The reduction reaction followed by EPR spectroscopy resulted in the formation of EPR silent Cu(I) states. Investigated Cu(II) complexes were found to be redox-active at physiological pH and might react with intracellular reductants. By EPR spin-trapping experiments, it was shown that investigated copper complexes are able to generate reactive oxygen species (ROS) via the Fenton-like reactions [1, 3].

This work was supported by the Slovak Grant Agency APVV (contract No. APVV-19-0024).

[1] Besleaga I., Stepanenko I., Petrasheuskaya T. V., Darvasiova D., Breza M., Hammerstad M., Marć M. A., Prado-Roller A., Spengler G., Popović-Bijelić A., Enyedy E. A., Rapta P., Shutalev A. D., Arion V. B. *Inorg. Chem. 60*, 11297 (2021).
[2] Milunovic M. N. 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 10*, 1213 (2020).
[3] Kuznetcova I., Bacher F., Alfadul S. M., Tham M. J. R., Ang W. H., Babak M. V., Rapta P., Arion V. B. *Inorg. Chem. 61*, 10167 (2022).

2P04
USAGE OF DOPPED SAPPHIRES AS MULTIMODAL MARKERS FOR IN-VIVO IMAGING

Martin Šácha[1]

[1]*Centrum pokročilého preklinického zobrazování, 1LF UK, Salmovská 3, 120 00 Praha, martin.sacha@lf1.cuni.cz*

The modern *in-vivo* imaging methods are struggling for biocompatible contrast markers which would allow coregistration of data from two or more different modalities, or from a single modality with different settings applied. During this year, we have prepared several sapphire (Al_2O_3) crystals with different dopants (Co, Sr, V, Y) at 0.5 %w concentration.

The presentation will cover the properties of said sapphires from the preclinical imaging point of

view and their usability as markers for MRI, CT, fluorescence and MPI.

The crystals have been grown at the Institute of Physics of the Czech Academy of Science under valuable leadership of Ing. Robert Král, Ph.D.

2P05
RELATIONSHIP BETWEEN PHOTOCATALYTIC DEGRADATION OF ORGANIC DYES AND PHOTOCATALYTIC WATER SPLITTING IN OXIDE AND SULFIDE SEMICONDUCTORS

Michal Žitňan[1], Surjyakanta Rana[1], Muhammad Iqbal[1], Vicente D. Rodríguez[2], Dušan Galusek[1,3], Pedro Núñez[4,5], José J. Velázquez[1]

[1]*FunGlass, Alexander Dubček University of Trenčín, Študentská 2, 91150 Trenčín, Slovakia, michal.zitnan@tnuni.sk*
[2]*Departamento de Física, Universidad de La Laguna, Apto. 456, 38200 La Laguna, Tenerife, Spain*
[3]*Joint Glass Centre of the IIC SAS, TnUAD and FChPT STU, Študentská 2, 91150 Trenčín, Slovakia*
[4]*Departamento de Química, U.D. Química Inorgánica, Universidad de La Laguna, Apto. 456, 38200 La Laguna, Tenerife, Spain*
[5]*Instituto de Materiales y Nanotecnología, Universidad de La Laguna, Apto. 456, 38200 La Laguna, Tenerife, Spain*

TiO_2 has gained huge attention as a material for application in photocatalytic water splitting. The performance of TiO_2 as a photocatalyst depends on various parameters including morphology, surface area, and crystallinity. In addition to TiO_2, a group of ZnCdS-based photocatalysts has emerged, which has the advantage of facile bandgap tuning from 2.55 eV for CdS to 3.6 eV for ZnS by changing the Zn/Cd ratio. The hydrogen production performance of titanium oxide and zinc-cadmium sulphide was studied by home-built photocatalytic set-up consisting of source of light and hydrogen production reactor located at the focuses of an elliptic cylinder reflector. The response to UV or VIS light can be registered independently. Hydrogen production was monitored continuously using a mass spectrometer from connected to the reactor outlet and reached almost 75% of TiO_2 performance for the $Zn_{0.7}Cd_{0.3}S$.

We have developed a photocatalytic reactor at the FunGlass center to compare the photocatalytic effect of samples with adjusted crystallinity or particle size without using the mass spectrometer. In this case the photocatalytic degradation of the organic dyes is employed and studied by UV-VIS spectroscopy. Use of photocatalytic organic dyes degradation process accelerates the selection of candidates for photocatalytic hydrogen evolution by water-splitting.

This item is a part of dissemination activities of project FunGlass. This project has received funding from the European Union´s Horizon 2020 research and innovation programme under grant agreement No 739566. This work was also supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract by grant VEGA 1/0844/21.

2P06
COMPUTATIONAL STUDY OF MODIFIED GRAPHENE-BASED NANOMATERIALS

Michal Malček[1], Simona Müllerová[1], Lukáš Bučinský[1], M. Natália D. S. Cordeiro[2]

[1]*Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics, Faculty of Chemical and Food Technology, STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia, michal.malcek@stuba.sk*
[2]*LAQV@REQUIMTE/Department of Chemistry and Biochemistry, Faculty of Sciences, University of Porto, 4169-007, Porto, Portugal*

Since the re-discovery of graphene in 2004, the graphene-based nanomaterials have attracted a considerable attention due to their unique properties. Modification of the graphene surface via doping with heteroatoms may significanly improve its electronic properties and chemical reactivity. These heteroatoms, coated on graphene surface, serve as active sites capable of adsorption of small gas molecules, such as oxygen, nitrogen, hydrogen etc. Circumcoronene (CC), being a polyaromatic hydrocarbon composed of 19 hexagonal rings, represents a model system of the tiny graphene quantum dot [1]. In the presented work, an adsorption ability of the CCs doped with different first raw transition metal (TM) atoms is studied using density functional theory (DFT). The nature of interatomic interactions between the TM atom and the adsorbed molecules (H_2, N_2, etc.) is investigated via density of states analysis and Bader's quantum theory of atoms in molecules (QTAIM) [2, 3]. It is found that the TM-doped CCs are able to bind up to three hydrogen molecules on one TM atom via η2-dihydrogen bonds [2, 3]. Hydrogen binding on the TM-doped CCs is significantly affected by the charge and spin state of the particular TM atom.

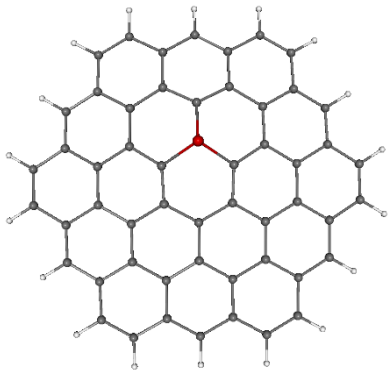


Fig. 1 Optimized structure of TM-doped CC.

We are grateful to the Slovak Grant Agencies: APVV (contracts No. APVV-19-0087 and APVV-20-0213) and VEGA (contracts No. 1/0139/20 and 1/0078/21).

[1] Malček M., Cordeiro M.N.D.S: *Phys E. 95*, 59 (2018).
[2] Malček M., Bučinský L.: *Theor. Chem. Acc. 139*, 167 (2020).
[3] Malček M. et al.: *Int. J. Hydrogen Energy 47*, 34570 (2022).

PREDNÁŠKY - SEKCIA 3: ANORGANICKÁ A MATERIÁLOVÁ CHÉMIA

3P01
NEUTRAL COBALT(II)-BIS(BENZIMIDAZOLE)PYRIDINE FIELD-INDUCED SINGLE-ION MAGNETS

Jana Juráková[1], Ivan Nemec[1,2], Radovan Herchel[2], 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, jana.jurakova@ceitec.vutbr.cz*
[2]*Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, Palacký University, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, Czech Republic*
[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 Chemical and Food Technology. Slovak University of Technology in Bratislava. Bratislava SK-81237, Slovakia*

Mononuclear single-molecule magnets (SMMs), also known as single-ion magnets (SIMs), offer a wide range of potential applications, including high-density data storage, quantum computing, and spintronic devices. Unlike materials with long-range magnetic ordering, the magnetic bistability of SMMs is solely based on molecular properties and does not depend on intermolecular interactions [1].

Two novel hexacoordinate Co(II)-based single-ion magnets were prepared and characterised. Both complexes feature the metal centre coordinated with one terminal and one bidentate nitrate anions along with tridentate derivatives of 2,6-bis(1*H*-benzimidazole-2-yl)pyridine ligand containing either n-octyl (complex **1**) or n-dodecyl (complex **2**) chains. The presence of long aliphatic chains ensures the solubility in the solvents frequently used for lithography patterning, such as chloroform.

Complexes **1** and **2** exhibit energy barrier U_{eff} in the range of 70 to 77 K and relaxation time τ_0 of the order of 10^{-11} s. The processability of compounds **1** and **2** was tested by lithographically controlled wetting and a versatile wet-lithography.

We would like to acknowledge the financial support from the Grant Agency of the Czech Republic Grant No. 22-23760S.

[1] D. Gatteschi, R. Sessoli, J. Villain, *Molecular Nanomagnets*, Oxford University Press, Oxford, 2007.

3P02
LIGHT-INDUCED ISOMERIZATION OF AZOPHENYL MOIETY IN SCO ACTIVE FE(II) COMPLEXES

Alexandra Šagátová[1], Jakub Orvoš[2], Ivan Šalitroš[1]

[1] *Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, Bratislava SK-81237, Slovakia, alexandra.sagatova@stuba.sk*
[2,]*Department of Organic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, Bratislava SK-81237, Slovakia*

The purpose was to prepare the spin crossover active Fe(II) complexes with bidentate N-donor organic ligands based on the pyridylbenzimidazole. The meta- or para- position of the photoactive azophenyl substituent on pyridyl caused a change in the magnetic profiles of the Fe(II) complexes and it has also influenced a

yield in *trans-cis* photoconversion. While the complexes $[Fe(L1)_3](X)_2$; X = ClO_4^-, CF_3SO_3, BF_4^- and L1 = *trans*-2-[4-(phenyldiazenyl)pyridin-2-yl]-1*H*-benzo[*d*]imidazole has the transition temperatures situated ~200 K, in the case of the $[Fe(L2)_3](X)_2$; X = ClO_4^-, CF_3SO_3, BF_4^- and L2 = *trans*-2-[5-(phenyldiazenyl)pyridin-2-yl]-1*H*-benzo[*d*]imidazole had the temperature shifted to higher temperatures. The ^{1}H-NMR spectroscopy was used to investigate the yield of *trans-cis* conversion of the complexes in DMSO solution during one hour of 365 nm light irradiation. It shows that the complexes of L1 were successfully converted in 20-30 % yield, while the photoisomerization for the complexes of L2 reached 40-50 % new *cis* phase. The photoconversion of all complexes was also studied in solid state and based on the UV-VIS spectra of thin films, where the photoisomerization was induced by light of 365 nm wavelength. It showed that $\pi \rightarrow \pi^*$ bond was decreased and $n \rightarrow \pi^*$ was increased so much more for the L2 complexes as in their L1 analogues.

Slovak grant agencies APVV-18-0197, APVV-18-0016, APVV-19-0087, VEGA 1/0029/22, and STU grant for young researchers MAFOMA are acknowledged for providing financial support.

3P03
MANGANATÉ KOORDINAČNÍ SLOUČENINY S MAKROCYKLYCKÝMI LIGANDY POHLEDEM KVANTOVÉ CHEMIE

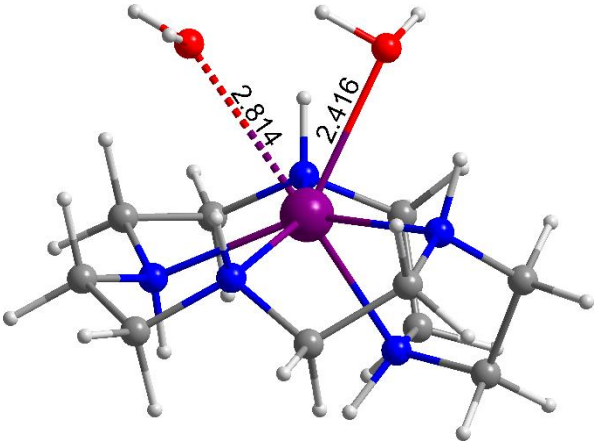
Marie Pražáková[1], Bohuslav Drahoš[1], Radovan Herchel[1]

[1]*Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 779 00 Olomouc, radovan.herchel@upol.cz*

Magnetická rezonance (MRI) je jednou z nejrozšířenějších neinvazivních diagnostických technik užívaných v medicíně, která umožňuje zobrazit měkké tkáně bez radiační zátěže. Vzhledem k nízké citlivosti a nedostatečnému kontrastu obrazu je při MRI často nutné použití tzv. kontrastní látky. Tyto paramagnetické látky zkracují relaxační časy (T_1, T_2) protonů vody a zvyšují kontrast obrazu mezi různými tkáněmi. Většina kontrastních látek užívaných v klinické praxi, je založena na paramagnetických iontech kovů, které jsou koordinovány chelátujícími ligandy do stabilních komplexů, aby se zabránilo toxicitě volných iontů kovů *in vivo* [1].

V této oblasti se používají zejména komplexy gadolitnité, avšak u pacientů s poruchou ledvin bylo nedávno prokázáno, že používání Gd(III) kontrastních látek může vyvolat potenciálně smrtelné onemocnění, tzv. nefrogenní systémovou fibrózu (NSF) [2]. V této souvislosti jsou jako alternativa široce zkoumány komplexy paramagnetických iontů přechodných kovů, zejména Mn(II). V mnohých vysokospinových Mn(II) komplexech se pozoruje dostatečně pomalá relaxace elektronového spinu (S = 5/2) a rychlá výměně koordinované vody, a tedy takové manganaté komplexy jsou nejslibnější náhradou za komplexy gadolinité. V současnosti jednou z látek obsahující Mn(II), která je předmětem pokročilých stádií klinického testování, je sloučenina MnPyC3A [3].

V samotné přednášce budou prezentovány výsledky teoretického studia termodynamické stability vybraných Mn(II) komplexů s makrocyklickými ligandy pomocí metod funkcionálu elektronové hustoty (DFT), budou diskutovány vlastnosti těchto komplexů (např. hodnoty hyperjemného štěpení atomů kyslíku koordinovaných molekul vody) a budou se diskutovat i aspekty samotného mechanismu výměny vody v této skupině sloučenin [4].



Obr. 1 Zobrazení molekulové struktury manganatého komplexu v tranzitním stavu odpovídajícímu výměně koordinované molekuly vody.

Autoři děkují za finanční podporu projektu Univerzity Palackého v Olomouci IGA_PrF_2023_007.

[1] Long N., Wong W-T. (Eds): *The chemistry of molecular imaging*, Wiley, (2015).
[2] Agarwal R., Brunelli S. M., Williams K., Mitchell M. D., Feldman H. I., Umscheid C. A.: *Nephrol., Dial., Transplant. 24*, 856 (2008).
[3] ClinicalTrials.gov., https://clinicaltrials.gov/ct2/show/NCT05413668, date of access: 16 February 2023., date of access: 16 February 2023

[4] Neese F., *Wiley Interdiscip. Rev.: Comput. Mol. Sci.*, *12*, e1606 (2022).

3P04
COBALT(II) COMPLEXES WITH BIS(PYRAZOLYL)PYRIDINE LIGANDS ACTING AS FIELD-INDUCED SINGLE-ION MAGNETS

Jana Juráková[1], Ivan Nemec[1,2], Radovan Herchel[2], Vinicius Tadeu Santana[1], Ivan Šalitroš[1,3]

[1]*Central European Institute of Technology, Brno University of Technology, Purkyňova 123, 61200 Brno Czech Republic*
[2]*Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, Palacký University, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, Czech Republic*
[3]*Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava. Bratislava SK-81237, Slovakia, ivan.salitros@stuba.sk*

Cobalt(II) transition metal complexes present an exciting class of coordination compounds often exhibiting magnetic bistability based on the slow relaxation of magnetization. This phenomenon exhibits reversible switching among the two projections of magnetization, that 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 [1-4].

Herein we present synthesis, structural, magnetic and spectral investigation on several Co(II) complexes acting as single molecule magnets. Careful molecular design and goal-directed synthesis of tridentate aromatic N-donor ligands, derivatives of bis(benzimidazole-1-yl)pyridine, allowed the preparation of neutral hexacoordinate Co(II) complexes decorated by n-octyl or n-dodecyl aliphatic chains, suitable for the deposition on surfaces via sublimation and by lithography techniques. The magnetic anisotropy of the systems presented was analyzed through magnetic measurements in static magnetic fields, as well as through EPR and FIRMS spectroscopies, and by means of ab initio calculations. The AC susceptibility measurements revealed field induced slow relaxation of magnetization accomplished via combination of Orbach, Raman and direct relaxation mechanisms.

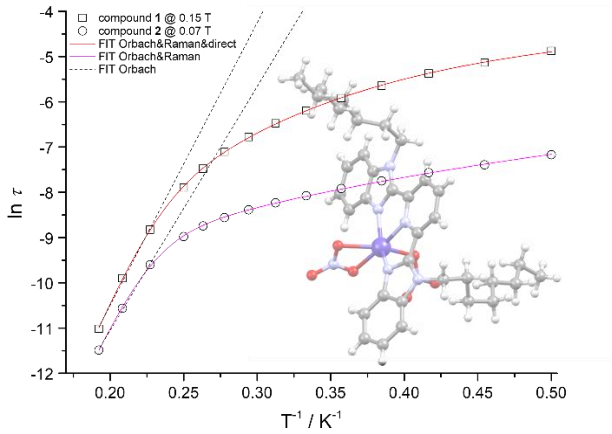


Fig. 1 Structure and lnτ vs 1/T dependencies of neutral field-induced Co(II)-SMMs with nitrate ligand anions

Grant agencies (APVV-22-0172, APVV-19-0087, VEGA 1/0029/22, GAČR 22-23760S) are acknowledged for the financial support.

[1] J. Juráková et al.: *Monatsh. Chem*. *153*, 1001 (2022).
[2] J. Juráková et al.: *Inorg. Chem. Front*. *9*, 1179 (2022).
[3] N. Malinová et al.: *Cryst Growth&Design*. *23*, 2430 (2023).
[4] B. Brachňaková et al.: *Dalton Trans*. *49*, 1249 (2020).

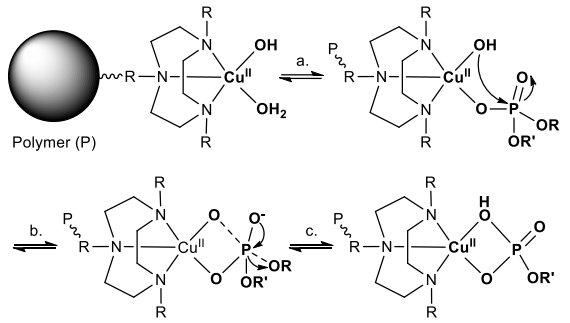
3P05
NUKLEÁZOVÁ AKTIVITA KOORDINAČNÝCH ZLÚČENÍN ZALOŽENÝCH NA DERIVÁTOCH TRIAZACYKLONONÁNU

Michaela Buziková[1], Jan Kotek[1]

[1]*Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy, Hlavova 2030/8, 128 00 Praha 2, Česká republika; buzikovm@natur.cuni.cz*

Biofilmy sú bakteriálne kolónie prichytené na určitý povrch pomocou polymérnej matrice, ktorej hlavné zložky sú proteíny a extracelulárna DNA („eDNA“). Vzhľadom na schopnosť baktérii kolonizovať takmer akýkoľvek syntetický či prírodný materiál a ich rozsiahlej rezistencii na antibiotiká predstavujú biofilmy významný problém dnešnej medicíny[1]. Biofilmy priľnuté na stenty, katétry či implantáty sú zodpovedné za veľkú časť ťažko liečiteľných infekcií a chronických rán [1]. eDNA je tiež schopná neutralizovať aktivitu antimikrobiálnych liečiv [2]. Možným riešením liečby infekcií spôsobených biofilmami sa ukazuje byť katalytická degradácia eDNA za použitia syntetických nukleáz – zlúčenín schopných štiepiť stabilné fosfodiesterové väzby v kostre DNA. Na tento účel boli testované rôzne

nízkomolekulárne komplexy prechodných kovov [3], vrátane komplexov makrocyklických ligandov, ktoré sú známe svojou stabilitou *in vivo*. Pre svoju katalytickú aktivitu boli študované najmä kovové komplexy derivátov 1,4,7-triazacyklononánu („TACN“)[3], vo väčšine prípadov obsahujúcich Cu^{2+} ako centrálny ión. Pripravili sme sériu nových derivátov ligandu TACN a zmerali hydrolytickú aktivitu ich meďnatých komplexov na modelovom substráte vo fyziologických podmienkach. Navrhli sme hydrolyticky dostatočne aktívne bifunkčné systémy s pendantným ramenom obsahujúcim funkčnú skupinu umožňujúcu pripojenie komplexu do vrstvy polyméru (Obr. 1), čím možno vytvoriť poťahový materiál pre medicínske pomôcky zabraňujúci tvorbe biofilmu.



Obr. 1: Navrhovaný mechanizmus hydrolýzy fosfoesterov; a. naviazanie fosfátu, b. intramolekulárny atak, c. štiepenie fosfátového esteru.

Táto práca je podporovaná GAČR (projekt no. 21-01090S).

[1] Khatoon, Z., McTiernan, C. D., Suuronen, E. J., Mah, T. & Alarcon, E. I., *Heliyon* 2018, 1–36.
[2] Walters, M. C. I., Roe, F., Bugnicourt, A., Franklin, M. J. & Stewart, P. S., *Antimicrob. Agents Chemother.* 2003, *47*, 317–323.
[3] Desbouis, D., Troitsky, I. P., Belousoff, M. J., Spiccia, L. & Graham, B., *Coord. Chem. Rev.* 2012, *256*, 897–937.

3P06
NEW MIXED CATION HEPTAFLUOROZIRCONATES/HAFNATES

Oksana Matselko[1], Morgane Poupon[2], Erika Samolova[2], Zuzana Vaskova[1], Blanka Kubíková[1], Zuzana Netriová[1], Matej Mičušík[3], Miroslav Boča[3]

[1]*Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, Bratislava, 84536, Slovakia, oksana.matselko@savba.sk*
[2]*Institute of Physics of the Czech Academy of Science, Na Slovance 2, Prague, CZ-182 21, Czech Republic*
[3]*Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, Bratislava, 845 41, Slovakia*

Among huge number of the ternary fluorides, various specific groups can be distinguished, in particular compounds with coordination number of seven for the central atom. The final constrains are type of cation and composition that give theoretically 12 representatives $A_3(Zr/Hf)F_7$, where A = Li-Cs, NH_4. Typical property of these compounds is the fact that central atom is coordinated exclusively by terminal fluorine atoms, while no bridging fluorines are present as is observed in various zirconium fluorides [1-3]. Mixed cation fluoride Na_2KZrF_7 together with the new isostructural Na_2KHfF_7 ($Pmn2_1$, a = 8.213(2) Å, b = 6.126(2) Å, c = 5.979(2) Å, Z = 2) and $Na_2K(Zr,Hf)F_7$ (a = 8.2210(8) Å, b = 6.1288(6) Å, c = 5.9792(10) Å) have been synthesized by reactions in aqueous solutions and structurally characterized by means of X-ray diffraction. XPS measurements confirm the presence of only terminally bonded fluorine atoms in their crystal structures of these compounds. Existence of the solid-solid phase transition at the elevated temperatures has been revealed during the differential scanning calorimetry experiments and further confirmed by the temperature dependent X-ray powder diffraction. Mixed cation phases Na_2KZrF_7, Na_2KHfF_7 and $Na_2K(Zr,Hf)F_7$ undergo the irreversible phase transformations which can be explained by decomposition over 400°C.

This work was supported by the Slovak Grant Agency VEGA 2/0024/20, Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-19-027 and European Union's Horizon 2020 research and innovation programme on the basis of a grant agreement under the Marie Skłodowska-Curie funding scheme No. 945478.

[1] Rakhmatullin A., Boča M., Mlynarikova J., Hadzimova E., Vaskova Z., Polovov I.B., Mičušik M.: *J. Fluorine Chem. 208*, 24 (2018).
[2] Boča M., Barborik P., Mičušik M., Omastova M.: *Solid State Sci. 14 (7)*, 828 (2012).

[3] Boča M., Molokeev M., Rakhmatullin A., Kubikova B., Netriova Z.: *New J. Chem. 44 (22)*, 9264 (2020).

3P07
GEOMETRICKÝ INDEX PRE HEXAKOORDINOVANÉ ZLÚČENINY

Ján Moncoľ[1]

[1]*Oddelenie anorganickej chémie, Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov, FCHPT, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, jan.moncol@stuba.sk*

V koordinačnej chémii a v chemickej kryštalografii je geometrický index alebo štruktúrny parameter (τ) číslo v rozsahu od 0 do 1, ktoré udáva, aká je geometria koordinačného centra. Prvý takýto parameter pre päť koordinovaných zlúčenín zaviedli v roku 1984 Addison a kol. [1]. Na rozlíšenie, či geometria koordinačného polyédra je trigonálna bipyramída alebo štvorcová pyramída, bol navrhnutý parameter τ_5 [1].

V roku 2007 Houser a kol. zaviedli analogický parameter τ_4 na rozlíšenie, či je geometria koordinačného polyédra štvorcovo planárna alebo tetraedrická [2].

Podobný parameter ešte nebol zavedený pre hexakoordinované zlúčeniny. Z týchto dôvodov existencie oktaedrických a trigonálne prizmatických komplexov je vhodné zaviesť nový index geometrie τ_6 na označenie geometrických hexakoordinačných komplexov.

Táto práca vznikla s podporou APVV-19-0087, VEGA 1/0686/23.

[1] Addison, A.W., Rao, N.T., Reedijk, J., van Rijn, J., Verschoor, G.C.: *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* (7), 1349 (1984).
[2] Yang, L., Powell, D.R., Houser, R.P.: *Dalton Trans.* (9), 955 (2007).

3P08
$In_2S_3/Bi_2WO_6/Fe_3O_4$ MAGNETIC CORE-SHELL STUCTURE AS AN EFFICIENT CATALYST FOR SONO-PHOTO HYBRID CATALYTIC DEGRADATION OF TETRACYCLINE

Mir Saeed Sajjadi[1], Robert Klement[1]

[1]*Department. of Functional Materials, FunGlass, Alexander Dubček University of Trenčín, Študentská 2, 911 50 Trenčín, Slovakia, mir.sajjadi@tnuni.sk*

In recent times, researchers have been exploring the use of combined advanced oxidation processes (AOPs) to address the removal of harmful compounds from wastewater. One promising approach is sonophotocatalysis, which exhibits the ability to efficiently degrade a wide range of contaminants [1]. One particular catalyst that shows potential is bismuth tungstate (Bi_2WO_6), an n-type semiconductor with a relatively narrow band gap (2.8–3.0 eV) [2]. However, the pristine form of Bi_2WO_6 is not without drawbacks, as it suffers from rapid recombination of photo-induced charges [2]. On the other hand, indium sulfide (In_2S_3) is another semiconductor with a narrow band gap (1.8–2.3 eV) and excellent response to visible light, featuring a negative conduction band (CB) edge. Unfortunately, its catalytic performance is hindered by sluggish carrier separation and migration kinetics [3]. To address the challenges faced by these catalysts, magnetic supports can be employed to facilitate effective recycling through the application of an external magnetic field, thereby overcoming the limitation of separation from the liquid phase. Accordingly, in this study, we prepared a Z-scheme $In_2S_3/Bi_2WO_6/Fe_3O_4$ magnetic core-shell structure catalyst for the purpose of sonophotocatalytic degradation of tetracycline (TC) and TC degradation kinetics were studied in details.

This item is a part of dissemination activities of project FunGlass. This project has received funding from the European Union´s Horizon 2020 research and innovation programme under grant agreement No 739566.

[1] Matafonova, G.; Batoev, V. *Water Research* 2019, 166, 115085.
[2] Shiamala, L.; Vignesh, K.; Jaffar Ali, B.M. *Fuel* 2023, 333, 126332.
[3] Liu, X.; Zhang, T.; Li, Y.; Zhang, J.; Du, Y.; Yang, Y.; Jiang, Y.; Lin, K. *Chemical Engineering Journal* 2021, 423, 130138.

3P09
PHOTOINDUCED MODIFICATION OF THE GE-AS-S GLASS SURFACE

Ekaterina Samsonova[1], Petr Kutálek[2], Eva Černošková[2], Petr Knotek[1], Jiří Schwarz[1]

[1]*Department of General and Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Czech Republic, ekaterina.samsonova@student.upce.cz;*
[2]*Joint Laboratory of Solid State Chemistry, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentská 84, 532 10 Pardubice, Czech Republic.*

Chalcogenide glasses are increasingly popular infrared optical materials because of their wide IR

transparency windows, superior thermal and chemical stability, and low cost. It can be useful in electronics, acoustics and optics. The Ge-As-S system is relatively robust materials for nonlinear optics and IR gratings [1].

The main intention of this study is to investigate the microstructures formation on Ge-As-S bulk glasses surfaces for stoichiometric and non-stoichiometric compositions. Ge-As-S glasses were synthesized by the melt-quenching technique. The illumination and photo-induced volume changes were performed by laser direct writing technique [2] using CW lasers (λ = 447, 532, 655 nm).

The highest microlenses (≈ 5.4 μm) were created on the surface of stoichiometric $(GeS_2)_{0.59}(As_2S_3)_{0.41}$ glass. The highest microlines on the surface of $Ge_{9.9}AS_{14.6}S_{75.5}$ non-stoichiometric glass had ≈ 3.6 μm. The reasons for these lie in the most probability in favorable the optical penetration depth of used light and thermal properties. Changes in the structural arrangement and chemical composition were not observed in the microlenses/microlines in comparison with non–illuminated area.

Photo-induced expansion and microlens formation were studied in-situ using a modified thermomechanical analyzer. It shows the material transient photo-expansion and subsequent relaxation upon switching off the light [3].

The work was supported by University of Pardubice, the Czech Republic (SGS2023).

[1] Yang Y., et al.: Journal of Non-Crystalline Solids, 440, 38-42, (2016).
[2] Silfvast W. T.: Laser fundamentals, Cambridge university press, (2004).
[3] Kutálek P., et al.: Applied Surface Science, 628, 157380, (2023).

3P10
PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE TENKÝCH VRSTEV CHALKOGENIDOVÝCH SKEL SYSTÉMŮ As-Se A As-S-Se Z MODIFIKOVANÉHO ROZTOKU SKLA $As_{50}Se_{50}$

Jiří Jemelka[1], Karel Pálka[1,2], Jiří Jančálek[2], Michal Kurka[2], Stanislav Šlang[2], Miroslav Vlček[1,2]

[1]*Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 95, Pardubice 532 10, Česká republika, jiri.jemelka@upce.cz*
[2]*Centrum materiálů a nanotechnologií, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 95, Pardubice 532 10, Česká republika*

Chalkogenidová skla jsou intenzivně studované polovodičové materiály díky svým žádoucím optickým vlastnostem, jako je široká oblast propustnosti v IČ spektru a vysoký index lomu [1]. Chalkogenidová skla lze použít jak ve formě objemového materiálu, tak i ve formě tenkých vrstev deponovaných na vhodném substrátu.

Tenké vrstvy lze připravit z roztoků chalkogenidových skel v těkavých bazických rozpouštědlech (aminy) např. pomocí metody spin-coating [2]. Příprava z roztoku zároveň umožňuje ovlivňovat složení připravené tenké vrstvy modifikací složení výchozího roztoku např. rozpouštěním dalších látek v již připraveném roztoku nebo mícháním několika roztoků chalkogenidových skel.

Tato práce se zabývá přípravou tenkých vrstev systémů As-Se a As-S-Se rozpouštěním elementární síry a selenu ve výchozím roztoku skla složení $As_{50}Se_{50}$. Z modifikovaných roztoků byly připraveny tenké vrstvy skel systémů As-Se ($As_{45}Se_{55}$, $As_{40}Se_{60}$, $As_{35}Se_{65}$, $As_{30}Se_{70}$) a As-S-Se ($As_{45}S_{10}Se_{45}$, $As_{40}S_{20}Se_{40}$, $As_{35}S_{30}Se_{35}$, $As_{30}S_{40}Se_{30}$). Tenké vrstvy všech složení (včetně výchozího složení $As_{50}Se_{50}$) byly připraveny v optické kvalitě pomocí metody spin-coating. V závislosti na složení a teplotní historii dochází k výrazným změnám chemické struktury připravených tenkých vrstev, která následně ovlivňuje jejich optické vlastnosti (index lomu, optická šířka zakázaného pásu) a chemickou odolnost. Tato metoda umožnuje připravit tenké vrstvy několika složení modifikací jednoho výchozího roztoku a řídit jejich optické a chemické vlastnosti.

Autoři této práce děkují za finanční podporu z projektu LM2023037 Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR a internímu grantu Univerzity Pardubice SGS2023_009.

[1] K. Tanaka, K. Shimakawa, Amorphous Chalcogenide Semiconductors and Related Materials, Springer, New York, 2021. ISBN 978-1-4419-9509-4.
[2] J. Orava, T. Kohoutek, and T. Wagner, Woodhead Publishing, Cambridge, UK, 265–309 (2014).

3P11
MOF-UHLÍKATÉ KOMPOZITY PRO SORPCI OXIDU UHLIČITÉHO

Tomáš Zelenka[1], Aleš Badač[1], Madhav Chavhan[1], Miroslav Almáši[2]

[1]*Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita, 30. dubna 22, 702 00 Ostrava, ČR, tomas.zelenka@osu.cz*
[2]*Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika, Moyzesová 11, SK-04101 Košice, SR*

Cílem příspěvku je seznámit posluchače s možnostmi přípravy MOF-uhlíkatých kompozitů, které mají potenciál využití při sorpci oxidu uhličitého, jednoho z hlavních skleníkových plynů.

V pórech původního a povrchově modifikovaného hierarchicky porézního uhlíkatého monolitu (označen jako HPCM) [1] byla provedena syntéza MOF materiálu (HKUST-1). Výsledné kompozity, včetně mateřských materiálů, byly podrobeny sorpci oxidu uhličitého při teplotě 273 K.

Bylo zjištěno, že čistý MOF materiál HKUST-1 adsorboval přibližně 4,2 mmol/g CO_2, HPCM materiál pak v rozmezí 1,1-2,1 mmol/g v závislosti na provedené modifikaci jeho povrchu. Kompozitní materiály dosahovaly adsorbovaných množství srovnatelných s mateřským MOF materiálem HKUST-1. Detailnější informace, včetně dalších analýz jak mateřských, tak kompozitních materiálů, budou poskytnuty v rámci prezentace příspěvku.

Práce vznikla za podpory grantu SGS12/PřF/2023, LUASK22049 (INTER-EXCELLENCE II, M˘SMT), SK-CZ-RD-21-0068.

[1] Bulavová P., Parmentier J., Slovák V.: *Microporous Mesoporous Mater.* 272, 155 (2018).

PREDNÁŠKY - SEKCIA 4: ORGANICKÁ CHÉMIA

4P01
MODIFIKOVANÉ NUKLEOFILY REAKTIVUJÍCÍ CHOLINESTERASY INHIBOVANÉ ORGANOFOSFOROVÝMI SLOUČENINAMI: SYNTÉZA A BIOLOGICKÁ AKTIVITA

Dávid Maliňák[1,2], Kamil Musílek[1,2], Tamara Zorbaz[3], Zuzana Kohoutová[1], Rudolf Andrýs[1], Karolína Knittelová[1], Adam Skarka[1], Monika Schmidt[1,2], Zrinka Kovarik[3]

[1]*Univerzita Hradec Králové, Přírodovědecká fakulta, Katedra chemie, Rokitanského 62, 500 03 Hradec Králové, Česká republika, david.malinak@uhk.cz*
[2]*Fakultní nemocnice Hradec Králové, Centrum biomedicínského výzkumu, Sokolská 581, 500 05 Hradec Králové, Česká republika*
[3]*Institute for Medical Research and Occupational Health, Ksaverska cesta 2, HR-10000, Zagreb, Croatia*

Organofosforové sloučeniny (např. nervově paralytické látky – sarin, VX nebo tabun) způsobují závažné intoxikace prostřednictvím inhibice acetylcholinesterasy (AChE) a butyrylcholinesterasy (BChE), což vede k cholinergní krizi nebo dokonce smrti intoxikovaného člověka. Jejich kauzální léčba je prováděna oximovými reaktivátory (např. pralidoxim, obidoxim, asoxim), které obnovují funkci AChE prostřednictvím nukleofilního ataku oximů v katalytickém aktivním místě inhibované cholinesterasy. Na základě studií naší výzkumné skupiny bylo prokázáno, že nukleofilitu oximových reaktivátorů lze modifikovat použitím dalších substituentů připojených v těsné blízkosti oximové části molekuly reaktivátoru. Takové modifikace vedou ke zvýšené tvorbě oximátového iontu, a tím ke zvýšené reaktivaci fosfylovaných cholinesteras. Velmi důležitá je také poloha substituentů a oximové skupině v syntetizovaných molekulách [1]. Zejména substituce atomy chloru vedla u některých syntetizovaných sloučenin k vysoké a rychlé reaktivaci sarinem, cyklosarinem nebo VX-inhibované AChE in vitro nebo in vivo [2, 3]. Na druhé straně substituce atomy fluoru vedla k ještě vyšší nukleofilitě (nižší hodnoty pK_a oximové skupiny), ale také k rychlejší degradaci reaktivátorů v pufrovaných podmínkách [3].

Zajímavé je, že některé modifikované reaktivátory se ukázaly být velice účinné in vitro pří obnově funkce AChE i BChE. Tyto výsledky jsou významným východiskem pro další podrobný výzkum modifikovaných oximových nukleofilů využitelných pro léčbu organofosforových intoxikací.

Tato práce byla podpořena Grantovou agenturou České republiky (č. 21-03000S).

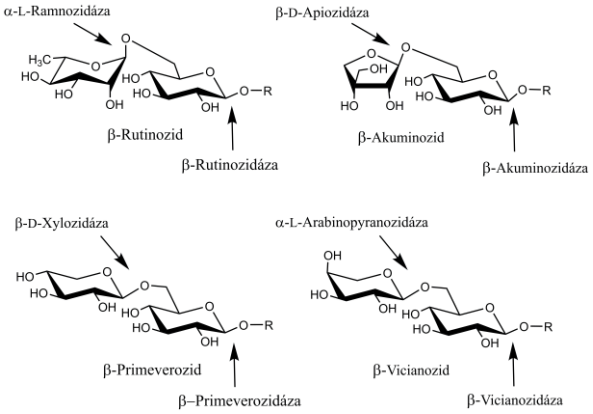
[1] Musilek K., Malinak D., Benek O.: *Patent CZ309329B6* (2022).
[2] Zorbaz T., Malinak D. et al.: *J. Med. Chem. 61*, 10753 (2018).
[3] Zorbaz T., Malinak D. et al.: *Eur. J. Med. Chem. 238*, 114377 (2022).

4P02
DIGLYKOZIDÁZY AKO NÁSTROJ SYNTÉZY ŠTRUKTÚROVANÝCH DIGLYKOZIDOV

Peter Haluz[1], Matej Cvečko[1], Elena Karnišová Potocká[1], Peter Kis[1], Mária Mastihubová[1], Vladimír Mastihuba[1]

[1]*Chemický ústav SAV, v.v.i., Dúbravská cesta 8507/9, 845 38 Bratislava, Slovensko, vladimir.mastihuba@savba.sk*

Diglykozidázy sú pomerne málo preskúmanou skupinou enzýmov hydrolyzujúcich glykozidovú väzbu medzi disacharidom a aglykónom na rozdiel od bežných monoglykozidáz (exoglykozidáz), koré odštepujú z diglykozidov jednotlivé monosacharidy (Obr. 1). Prevažná väčšina diglykozidáz sú retenujúce glykozidhydrolázy, čo znamená že okrem hydrolýzy ich možno využiť aj na syntézu glykozylovaných disacharidov cestou transglykozylácie. Diglykozidázami rôzneho pôvodu (*β*-rutinozidáza z kvetných pukov sofory japonskej resp. z pohánky tatárskej, *β*-robinobiozidáza z rešetliaka prečisťujúceho, *β*-akuminozidáza z *Penicillium multicolor*) sme pripravili príslušné diglykozidy tyrozolu pričom sa tieto enzýmy výrazne líšili v reaktivite voči primárnemu a fenolickému hydroxylu [1, 2].



Obr. 1 Exoglykozidázy a diglykozidázy: substráty a miesta ich hydrolýzy

Výskum bol podporený projektami APVV-18-0188 a VEGA 2/0111/22.

[1] Karnišová Potocká E. a kol.: *Food Chem.* 336, 127674 (2021).
[2] Haluz P. a kol.: *Int. J. Mol. Sci.* 24, 5943 (2023).

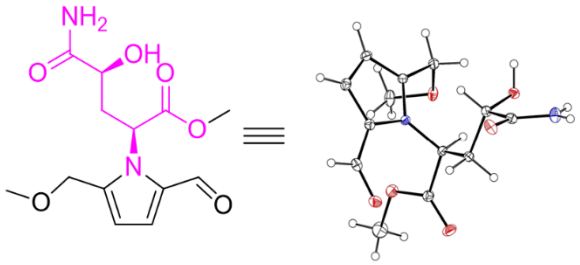
4P03
TOTAL SYNTHESIS OF HEMEROCALLISAMINE I PAVED BY GRAM-SCALE SYNTHESIS OF (2*S*,4*S*)-4-HYDROXYGLUTAMIC ACID LACTONE

Lucia Pinčeková[1], Eva Jančiová[1], Dušan Berkeš[1], Róbert Gyepes[2], Andrej Kolarovič[3], Oľga Caletková[1]

[1]*Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia, lucia.pincekova@stuba.sk*
[2]*Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, Charles University, Hlavova 2030, 128 40 Prague, Czech Republic*
[3]*Department of Chemistry, Faculty of Education, Trnava University, Priemyselná 4, 918 43 Trnava, Slovakia*

The total synthesis of the sedative pyrrolic 4-hydroxyglutamine alkaloid (–)-hemerocallisamine I was successfully accomplished in both racemic and enantiopure forms [1]. The synthetic approach involves utilizing (2*S*,4*S*)-4-hydroxyglutamic acid lactone as a pivotal intermediate. Two key strategies were employed, namely crystallization-induced diastereomer transformation (CIDT) and Maillard reaction. By commencing with an achiral starting material, the target stereogenic centres were successfully introduced through this highly selective process – crystallization-induced diastereomer transformation (CIDT). A vital step in the synthesis involved employing a Maillard-type condensation to construct the desired pyrrolic framework. Since Maillard condensations

targeting the 2-formylpyrrole framework have proven challenging, optimization studies were carried out using a suitable sugar surrogate. Additionally, gram quantities of (2*S*,4*S*)-4-hydroxyglutamic acid lactone were prepared from an achiral substrate, and the first synthesis of racemic (±)-hemerocallisamine I was described in 11 steps, and a 5.9% overall yield in a parallel manner. The relative configuration of the prepared natural product was confirmed by X-ray analysis (Picture 1) [2].



Picture 1. Hemerocallisamine I

This research was supported by the Slovak Research and Development Agency and VEGA under Contract No. APVV-20-0298 and VEGA 1/0411/22.

[1] Matsumoto, T.; Nakamura, S.; Ohta, T.; Fujimoto, K.; Yoshikawa, M.; Ogawa, K.; Matsuda, H. *Org. Lett.* 2014, 16, 3076–3078.
[2] Pinčeková, L.; Jančiová, E.; Berkeš, D.; Gyepes, R.; Kolarovič, A.; Caletková, O. *Molecules*, 2023, 28 (5), 2177.

4P04
SAR STUDIES OF NOVEL MACROCYCLIC ANTIBIOTIC BERKELEYLACTONE A

Dominika Valachová[1], Tomáš Malatinský[1], Pavol Jakubec[1], Oľga Caletková[1], Dušan Berkeš[1]

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

The rise and spread of drug-resistant bacterial strains pose an imminent threat to public health. Urgent action is required to develop novel antibacterial agents that can counteract this dangerous trend and prevent a potential crisis. Berkeleylactone A, a highly potent 16-membered macrolactone antibiotic recently discovered in a fungal coculture from Berkeley Pit Lake exhibited promising antibacterial activities, especially against methicillin-resistant *S. aureus* (MRSA) strains [1, 2]. Significantly, berkeleylactone A was reported to deviate from the known modes of action typically associated with macrolide antibiotics. With the intention to shed a little light on its structure-activity relationship, a range of berkeleylactone A derivatives was synthesized and their *in vitro* antimicrobial activities against both methicillin-sensitive and methicillin-resistant *Staphylococcus aureus* (MRSA) strains were examined. Obtained data confirmed the essential role of the conjugated system as responsible for antibiotic activity and suggested unmasking the active Michael acceptor by retro-*sulfa*-Michael reaction. Significant improvement of activity was observed for structurally simplified macrolactam analogue with MIC_{50} = 0.39 µg/mL for methicillin-resistant *S. aureus*, a value 8-fold lower than that of natural berkeleylactone A [3]. Antibacterial activity of prepared derivatives against a panel of both gram-positive and gram-negative bacterial strains was also tested.

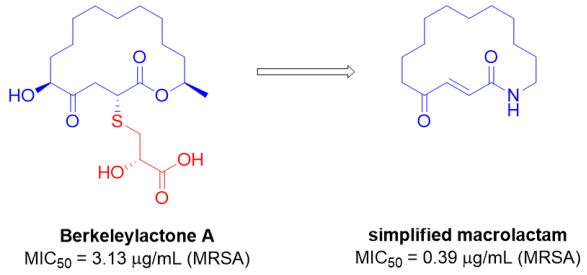


Fig. 1 Structure of berkeleylactone A and most potent macrolactam analogue

This research was supported by the Slovak Research and Development Agency and VEGA under Contract No. APVV-20-0298 and VEGA 1/0411/22.

[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] Malatinský, T.; Valachová, D.; Pinčeková, L.; Scherhaufer, D.; Olejníková, P.; Májeková, M.; Vargová, J.; Gaalová-Radochová, B.; Bujdáková, H.; Nováčiková, J.; Farley, A.; Berkeš, D.; Jakubec, P.; Kolarovič, A.; Caletková, O. *Org. Biomol. Chem.* 2022**,** *20***,** 7821-7832.

4P05
PRÍPRAVA A VYUŽITIE OLIGONUKLEOTIDOV S TERMINÁLNOU DIFOSFÁTOVOU SKUPINOU

Ján Matyašovský[1], Pavol Čekan[1]

[1]*MultiplexDx, Ilkovičova 8, 84104 Bratislava 4, Slovenská republika, matyasovsky@multiplexdx.com*

Polyfosfátové väzby predstavujú dôležité štruktúry v prirodzene sa vyskytujúcich nukleotidoch a oligonukleotidoch. Dajú sa napríklad nájsť ako terminálne skupiny na molekulách RNA prokaryotických a eukaryotických buniek vo forme 'RNA cap' (RNA čiapočky) [1, 2].

Laboratórne pripravené oligonukleotidy nesúce polyfosfáty majú rôzne využitie v oblastiach molekulárnej biológie. fPAR-CLIP je laboratórna technika umožňujúca identifikáciu špecifických častí RNA, ktoré zodpovedajú na interakcie s RNA viažucimi sa proteínmi. Výhodou tejto metódy je použitie fluorescencie miesto rádioaktivity v procese izolácie komplexov proteín-RNA viazaných kovalentnou väzbou [3]. Toto je zabezpečené priamou ligáciou medzi fluorescenčne značeným adaptérom a bunkovej RNA. Adaptér je pripravený metódami chemickej syntézy, kde dochádza k formovaniu difosfátovej skupiny na 5' konci oligonukleotidu v procese preadenylácie. Táto reakcia za podmienok známych v literatúre prebieha s nedokonalou konverziou. Preto je snaha o optimalizáciu tohto reakčného kroku možnosťou, ako zefektívniť metódu fPAR-CLIP. Zvýšenie konverzie reakcie má zmysel z ekonomického, ale aj ekologického hľadiska.

[1] Ramanathan, A.; Robb, B.; Chan, S.: *Nucleic Acid Res. 44*, 7511 (2016).
[2] Hudeček, O.; Benoni, R.; Reyes-Gutierrez, P. E.; Culka, M.; Šanderová, H.; Hubálek, M.; Rulíšek, L.; Svačka, J.; Krásný, L.; Cahová, H.: *Nature Comm. 11*, 1052 (2020).
[3] Anastasakis, D. G.; Jacob, A.; Konstantinidou, P.; Meguro, K.; Claypool, D.; Cekan, P.; Haase, A. D.; Hafner, M.: *Nucleic Acid Res. 49*, e45 (2021).

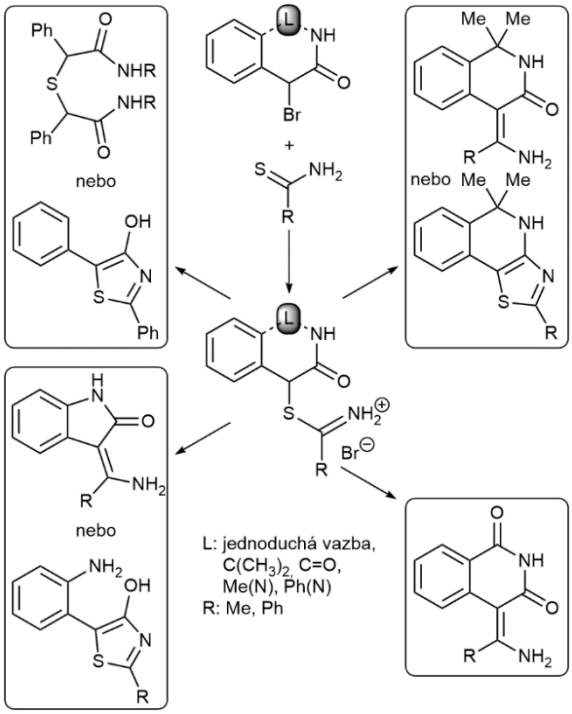
4P06
ESCHENMOSEROVA REAKCE PRIMÁRNÍCH THIOAMIDŮ – KDY FUNGUJE A KDY NIKOLIV

Jiří Hanusek[1], Lukáš Marek[1], Jiří Váňa[1], Jan Svoboda[1]

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

V předchozích letech jsme se na našem pracovišti zabývali využitím *Eschenmoserovy* reakce při syntéze různých biologicky účinných látek a úspěšně jsme syntetizovali řadu inhibitorů kináz, včetně léčiva idiopatické pulmonární fibrózy *Nintedanibu* [1]. Při našem výzkumu jsme zjistili, že v řadě případů lze překvapivě jako výchozí látky použít i primární thioamidy [2], které byly v dosavadní literatuře zavrhovány z důvodu přednostní tvorby odlišných produktů.

Tato práce se zabývá identifikací faktorů, které umožňují úspěšný průběh *Eschenmoserovy* reakce modelových thioamidů s různými α-bromlaktamy, jako jsou 3-bromoxindol, 4-brom-1,1-dimethyl-1,4-dihydroisochinolin-3(2*H*)-on a 4-bromisochinolin-1,3(2*H*,4*H*)-dion nebo 2-brom(fenyl)acetamidy (Obr 1).



Obr. 1 Produkty reakce α-bromlaktamů/amidů s primárními thioamidy.

Bylo zjištěno [3], že klíčovým faktorem pro úspěšnou realizaci *Eschenmoserovy* reakce je acidita intermediární α-thioiminiové soli na atomech dusíku a α-uhlíku a s tím související bazicita použité báze. Jako optimální báze se jeví

bezvodý $KHCO_3$ (pK_a = 6.35) v polárním aprotickém rozpouštědle (DMF, MeCN). Přítomnost thiofilního činidla (fosfinu, fosfitu), rutinně používaného v publikovaných syntézách nemá překvapivě pozitivní vliv na průběh reakce. Zatímco u α-bromlaktamů je volbou podmínek možné připravit buď produkty *Eschenmoserovy* reakce (enaminy) nebo *Hantzschovy* reakce (thiazoly), z α-bromamidů vznikají pouze thiazoly nebo produkt bazicky katalyzované eliminace a alkylace (symetrický sulfid). Důvody pro rozdílnou reaktivitu budou diskutovány i s ohledem na provedené kvantově-chemické výpočty.

Autoři děkují MŠMT ČR a Univerzitě Pardubice za institucionální finanční podporu.

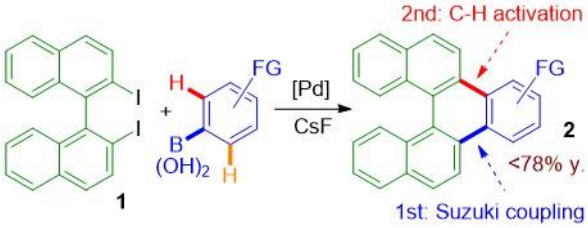
[1] Marek L., Váňa J., Svoboda J., Hanusek J.: *J. Org. Chem. 86*, 10621 (2021).
[2] Marek L., Kolman L., Váňa J., Svoboda J., Hanusek J.: *Beilstein J. Org. Chem. 17*, 527 (2021).
[3] Marek L., Váňa J., Svoboda J., Hanusek J.: *Beilstein J. Org. Chem. 19*, 808 (2023).

4P07
TANDEM ARYLATION OF BINAPHTHYL BY SUZUKI COUPLING AND C–H ACTIVATION

Martin Putala, Filip Bulko

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

In the arylation of binaphthyl diiodide **1** by the Suzuki reaction to form diarylated products [1, 2], we found that the helicene side product **2** is formed with some boronic acids as a result of the primary monoarylation by Suzuki reaction followed by intramolecular arylation by C–H activation. By optimizing the reaction conditions, we developed this initially side reaction into a step-efficient approach for the synthesis of unsymmetrically substituted naphtho[1,2-*g*]chrysenes **2**. Substrate screening examining over 30 *meta*- and/or *para*-substituted arylboronic acids showed that this approach provides the desired helicene products **2** most effectively if arylboronic acids have a small acidifying group at *meta*-position. In the case of unsymmetrically substituted arylboronic acids, the regioselectivity of C–H activation is directed by the attached group(s), its effect on the C–H acidity of the adjacent position, its coordination ability, as well as steric hindrance.



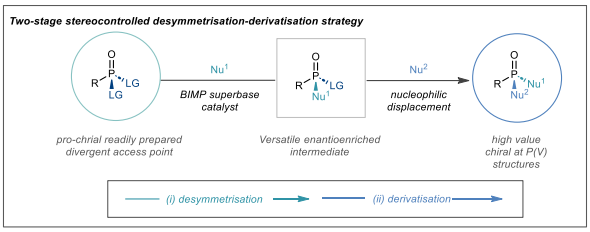
[1] Brath H., Mešková M., Putala M.: *Eur. J. Org. Chem.* 3315 (2009).
[2] Bulko F., Májek M., Putala M.: *J. Org. Chem. 87*, 9316 (2022).

4P08
CATALYTIC ENANTIOSELECTIVE NUCLEOPHILIC DESYMMETRISATION AT P(V)

Branislav Ferko[1,2], Darren J Dixon[1]

[1]*Department of Chemistry, University of Oxford, Chemistry Research Laboratory, 12 Mansfield Road, Oxford OX1 3TA, UK, ferkob48@gmail.com*
[2]*Department of Organic Chemistry, Slovak University of Technology, Radlinskeho 9, 81237 Bratislava, Slovakia*

Molecules that contain a stereogenic phosphorus atom are crucial to medicine, agrochemistry and catalysis. While methods are available for the selective construction of various chiral organophosphorus compounds, catalytic enantioselective approaches for their synthesis are far less common. Given the vastness of possible substituent combinations around a phosphorus atom, protocols for their preparation should also be divergent, providing facile access not only to one but to many classes of phosphorus compounds. Here we introduce a catalytic and enantioselective strategy for the preparation of an enantioenriched phosphorus(V) centre that can be diversified enantiospecifically to a wide range of biologically relevant phosphorus(V) compounds. This protocol, consisting of a bifunctional iminophosphorane catalyzed nucleophilic desymmetrisation of prochiral, bench stable P(V) precursors and subsequent enantiospecific substitution allows for divergent access to a wide range of *C*-, *N*-, *O*- and *S*- substituted P(V) containing compounds from a handful of enantioenriched precursors [1, 2].



European Union's Horizon 2020 research and innovation program under the Marie Sklodowska Curie grant agreement No. 101033408, Slovak Research and Development Agency No. APVV20-0298.

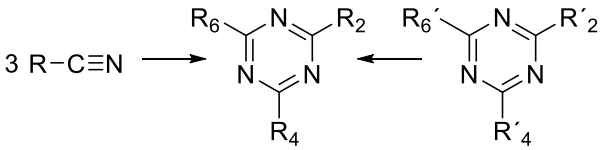
[1] Formica, M.; Rogova, T.; Shi, H.; Sahara, N.; Ferko, B.; Farley, A.J.M.; Christensen, K.E.; Duarte, F.; Yamazaki. K.; Dixon, D.J. *Nat. Chem.* **2023**, *15*, 714-721.
[2] Manuscript in preparation.

4P09
1,3,5-TRIAZÍNY A ICH SYNTETICKO-BIOLOGICKÝ POTENCIÁL

Viktor Milata[1], Branislav Pavílek[1], Dušan Bortňák[1], Daniel Végh[1]

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

Triazíny sú organické zlúčeniny s tromi atómami dusíka v šesťčlennom aromatickom kruhu, ktorý je práve ich prítomnosťou silne deaktivovaný. Zatiaľ čo 1,2,3-triazíny (tzv. vicinálne) a 1,2,4-izoméry (tzv. asymetrické) sú pomerne menej časté ako ich symetrické izoméry – 1,3,5-triazíny. Ich príprava je založená na dvoch základných prístupoch: trimerizácii nitrilov alebo premene substituentov triazínového jadra:



Obr. 1 Základné spôsoby prípravy 1,3,5-triazínov.

Cyklotrimerizácia nitrilov je použiteľná hlavne na prípravu rovnako 2,4,6-trisubstituovaných 1,3,5-triazínov. Príprava nerovnako substituovaných 1,3,5-triazínov je založená na premene substituentov triazínového jadra, pričom veľmi často býva východiskovou surovinou 2,4,6-trichlórderivát – tzv. kyanurchlorid. Metóda má výhodu nielen variáciami pridávania jednotlivých reagentov, ale aj znižujúcou sa reaktivitou intermediátov zvyšujúcim sa počtom substituentov.

V prednáške budú diskutované jednotlivé 1,3,5-triazíny, ktoré našli uplatnenie v rôznych oblastiach každodenného života, avšak najzná–mejšie sú asi aplikácie v medicíne a najmä v poľnohospodárstve.

Tento príspevok vznikol vďaka podpore v rámci Operačného programu Integrovaná infraštruktúra pre projekt: „Strategický výskum v oblasti SMART monitorovania, liečby a preventívnej ochrany pred koronavírusom (SARS-CoV-2)", Projekt č. 313011ASS8, spolufinancovaný Európskym regionálnym rozvojom a Fondom Agentúry pre vedecko-technickú pomoc na základe zmluvy č. APVV-17-0513 a APVV-20-0213.

[1] The Triazine Herbicides, 50 years Revolutionizing Agriculture, ed. LeBaron H. M., McFarland J. E., Burnside O. C., Elsevier 2008, 584 s. doi: https://doi.org/10.1016/B978-0-444-51167-6.X5001-6, ISBN: 978-0-444-51167-6.
[2] Singh S., Mandal M. K., Masih A., Saha A., Ghosh S. K., Bhat H. R., Singh U. P.: *Arch. Pharm.* E202000363 (2021).
[3] Milata V., Claramunt R.M., Cabildo P., Cornago P., Elguero J.: 2,4,6-Tris(Azol-1-yl)-1,3,5-Triazines: A New Class of Multidentate Ligands. *Heterocycles* 55(5), 905-924 (2001).

4P10
TRANSFORMATIONS OF THE SYNTHETIC CHAMELEON

Pavol Jakubec[1]

[1]*Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia, pavol.jakubec@stuba.sk*

A favourite of many experienced experimentalists, nitroalkanes are considered one of the fascinating raw materials in organic chemistry. They are readily available by multiple synthetic strategies, including direct nitration of hydrocarbons, nucleophilic displacement of alkyl halides by nitrite anion, and oxidation of amines or reduction of nitroalkenes. Nitroalkanes offer even more variety in their reactivity. Well-developed are transformations of nitroalkanes to oximes, hydroxylamines, amines, and carbonyl compounds referred to as the Nef reaction. Due to the higher acidity of the α-position next to the nitro group, nitroalkanes could be deprotonated, giving rise to nitronates, which further react in *C*-alkylation and *C*-arylation, the Henry reaction, the Michael addition, and the nitro-Mannich reaction. The reactivity richness has been so overwhelming that in 1985 Seebach described the nitro group as having "chameleon qualities" (from German "*Chamäleon-Qualitäten*") [1]. This expression

inspired chemists to nickname the nitro group "synthetic chameleon."

Here we present improved and novel transformations of nitro compounds with a major emphasis on their high stereoselectivity, technical simplicity, and sustainability. These ideas are exemplified by a stereoselective nitro-Mannich reaction driven by crystallization [2] and a visible-light-promoted cross-coupling of nitrostyrenes and Katritzky salts [3].

This research was supported by the Slovak Research and Development Agency under contract No. APVV-20-0298 and VEGA 1/0411/22.

[1] Calderari G., Seebach D.: *Helv. Chim. Acta 68*, 1592 (1985).
[2] Marčeková M., Gerža P., Šoral M., Moncol J., Berkeš D., Kolarovič A., Jakubec P.: *Org. Lett. 21*, 4580 (2019).
[3] Ferko B., Marčeková M., Detková K. R., Doháňošová J., Berkeš D., Jakubec P.: *Org. Lett. 23*, 8705 (2021).

4P11
^{15}N NMR STUDIE AZO-HYDRAZO TAUTOMERIE V PRŮMYSLOVĚ VYRÁBĚNÝCH AZOBARVIVECH

Antonín Lyčka[1]

[1]*Univerzita Hradec Králové, Přírodovědecká fakulta, Rokitanského 62, CZ-500 03 Hradec Králové, Česká republika, antonin.lycka@uhk.cz*

^{15}N NMR data ($^1J(^{15}N, ^1H)$ interakční konstanty a ^{15}N chemické posuny) byla využita ke kvantitativní charakterizaci azo-hydrazo tautomerie v některých průmyslově vyráběných azobarvivech. Jak $^1J(^{15}N, ^1H)$ interakční konstanty tak i ^{15}N chemické posuny byly změřeny v přirozeném zastoupení izotopu ^{15}N s využitím inverzní detekce signálů [1]. Byla změřena a analyzována ^{15}N NMR spektra Disperse Yellow 3, Disperse Yellow 7, Acid Orange 12, Acid Red 29, Acid Red 73, Acid Red 176, Naphthol Blue Black a Acid Black 1.

Byly jednoznačně prokázány všechny tři možné typy existence: (i) barviva existující kompletně v azo formách, (ii) barviva existující kompletně v hydrazo formách nebo (iii) barviva vytvářející azo-hydrazo tautomerní rovnováhy.

[1] Lyčka A.: *Dyes and Pigments*, 209B, 110896 (2023).

4P12
STEREOSELECTIVE SYNTHESIS OF INDOLIZIDINE ALKALOIDS FROM L-GLUTAMIC ACID

Paula Fraňová[1], Štefan Marchalín[1], Peter Šafář[1]

[1]*Department of Organic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK-81237 Bratislava, Slovakia, paula.franova@stuba.sk*

Indolizidine alkaloids are widely distributed in natural products and have been isolated from different natural sources: animals, plants, microorganisms, and fungi. They are believed to serve as chemical defense against predators or microorganisms and display a wide array of biological activity [1].

Polyhydroxyindolizidines are among the indolizidine alkaloids certainly most prominent representatives. They belong to a group of substances called iminosugars, which are carbohydrate analogs with endocyclic oxygen replaced by a nitrogen atom. The ongoing interest in these derivatives is due to the potent inhibitory activity against glycosidases attributed to their carbohydrate-mimicking structure. These enzymes catalyze the hydrolysis of the glycosidic bond of carbohydrates and participate in a number of biologically important processes, such as post-translational protein processing or digestive processes. Therefore, iminosugars are suitable candidates for treating diseases associated with these processes [1, 2].

SSThis work presents a synthesis of new analogs of indolizidine alkaloids utilizing L-glutamic acid as a cheap and bioavailable starting material. The work is mostly focused on the synthesis of tetra [3]- and pentahydroxylated spirocyclopentaneindolizidines, and part of the work is devoted to the synthesis of novel aminoindolizidines. The key transformations of the syntheses include asymmetric double bond *cis*-dihydroxylation, ring-closing metathesis, lactam reduction, α-amide *C*-alkylation, and nucleophilic substitution.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under contract no. APVV-20-0298, and Grant Agency of the Slovak Republic (No. 1/0152/23) that receive here all our thanks.

[1] Michael, J. P., Simple indolizidine and quinolizidine alkaloids in *The alkaloids: chemistry and biology*, 2016, *75*, 1-498.
[2] Fraňová, P.; Marchalín, Š. *Eur. J. Org. Chem.* 2022, 35, e202200742

[3] Fraňová, P.; Marchalín, Š.; Šafář, P.; Cvečko, M.; Moncol, J.; Žídeková, I.; Othman, M.; Daïch, A. *New J. Chem.* 2021, *45*, 15956-15967.

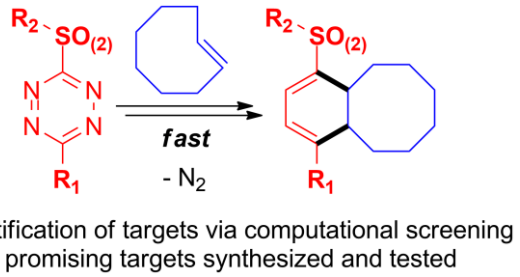
4P13
SUFLONES AND SULFOXIDES - THE KEY TO IMPROVED PROPERTIES OF TETRAZINES FOR BIOORTHOGONAL APPLICATIONS

Michal Májek[1], Margarita Valentine[1], Matej Trtúšek[1]

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

Attempts to perform organic reactions selectively inside biological systems, such as the living cell, were often met with limited success due to incompatibility of standard organic reagents with the biological environment – a system that contains reactive functional groups as well as water and oxygen. Bioorganic chemistry has been successful at developing new reactions, which do not suffer such issues, and provide the necessary selectivity in such complex environments [1]. Especially important was the development of inverse electron demand Diels-Alder reactions of tetrazines and strained alkenes/alkynes [2].

In order to be practical, the biorthogonal reaction has to proceed at a very high rate, as the concentrations of the respective reagents are usually low. We have performed DFT calculations to identify new candidates fulfilling this requirement. This led to identification of new highly-reactive tetrazines bearing sulfone and sulfoxide functional groups. The candidates selected by the computational study were successfully synthesized and tested.



Obr. 1 New tetrazines offering improved reaction rates

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] Seckute J., Devaraj N. K.: *Curr. Opin. Chem. Biol. 17*, 761 (2013).

4P14
SHED LIGHT ON TRIARYLHYDRAZONE PHOTOSWITCHES

Marek Cigáň[1], Anna M. Grabarz[2,3], Lea Hegedüsová[1], Lukáš F. Pašteka[2], Šimon Budzák[4], Miroslav Medveď[4], Juraj Filo[1], Bernard Mravec[1], Chavdar Slavov[5], Josef Wachtveitl[5], Nadine Blaise[5]

[1]*Department of Organic Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Ilkovičova 6, 84215 Bratislava, Slovakia, marek.cigan@uniba.sk*
[2]*Department of Physical and Theoretical Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Ilkovičova 6, 84215 Bratislava, Slovakia*
[3]*Institute of Advanced Materials, Faculty of Chemistry, Wrocław University of Science and Technology, Wyb. Wyspiańskiego 27, PL–50370 Wrocław, Poland*
[4]*Department of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Matej Bel University, Tajovského 40, 97400 Banská Bystrica, Slovakia*
[5]*Institute of Physical and Theoretical Chemistry, Faculty of Biochemistry, Chemistry, Pharmacy, Goethe University, Max-von-Laue-Str. 7, 60438 Frankfurt am Main, Germany*

Hydrazones represent an important new class of molecular photoswitches that are characterized by straightforward synthesis, easy skeleton modularity, resistance to hydrolysis, and particularly bistable photoswiching between two thermally highly stable isomers [1, 2].

In this lecture, we introduce new benzothiazole-based triarylhydrazone photoswitches that exhibit red-shift of absorption bands of both isomers to more desirable spectral range above 365 nm compared to familiar diarylhydrazone photoswitches. Moreover, they simultaneously show doubling of the thermal half-life of a metastable isomer with respect to the previously most promising 2-(naphthoyl)quinoline triarylhydrazone photoswitch. Fundamental photoswitching parameters were investigated in detail by a combination of advanced spectroscopic techniques (ultrafast transient absorption spectroscopy, laser flash photolysis) and (time-dependent) density functional theory ((TD)-DFT) calculations.

Another benefit of the incorporation of benzothiazole moiety to their structure is weakening of the *Z* isomer intramolecular hydrogen bonding in excited state, leading to enhanced efficiency of light-induced *Z*-to-*E* isomerization compared to benzoylpyridine analogues. Last, but not least, replacement of pyridine aromatic ring with benzothiazole unit facilitates the skeleton modification and thus

enables the synthesis of highly tuneable triarylhydrazones that could be possibly functionalized in all three aromatic rings.

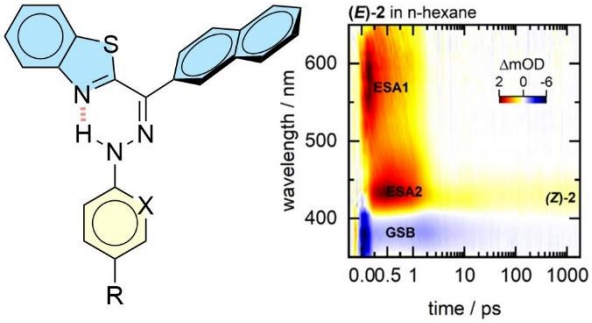


Fig. 1 Structure of prepared hydrazone photoswitches (left) and transient absorption data for the *E*-to-*Z* isomerization of hydrazone **2** bearing unsubstituted phenyl ring in the hydrazine part of the skeleton.

This work was funded by the Slovak Research and Development Agency (APVV-20-0098).

[1] Shao B., Qian H., Li Q., Aprahamian I.: *J. Am. Chem. Soc. 141*, 8364 (2019).
[2] Mravec B., Budzák Š., Medved' M., Pašteka L.F, Slavov C., Saßmannshausen T., Wachtveitl J., Kožíšek J., Hegedüsová L., Filo J., Cigáň M.: *J. Org. Chem. 86*, 11633 (2021).

4P15
INSIGHTS INTO THE PHOTOSWITCHING BEHAVIOUR OF UNSYMMETRICAL BENZOTHIAZOLE-BASED DITHIENYLETHENES

Juraj Filo[1], Marek Cigáň[1], Šimon Budzák[2], Ivica Sigmundová[1], Peter Magdolen[1], Eliška Procházková[3], Michelangelo Bovoloni[4], Matteo Tommasini[5], Andrea Bianco[4]

[1]*Department of Organic Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovakia, juraj.filo@uniba.sk*
[2]*Department of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Matej Bel University, Tajovského 40, 974 01 Banská Bystrica, Slovakia*
[3]*NMR Spectroscopy Department, Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Czech Academy of Sciences, Flemingovo Nám. 2, 160 00 Prague 6, Czech Republic*
[4]*INAF-Osservatorio Astronomico di Brera, Via Bianchi 46, 23807, Merate, Italy*
[5]*Dipartimento di Chimica, Materiali e Ingegneria Chimica ''G. Natta'', Politecnico di Milano, Piazza Leonardo Da Vinci 32, 20133 Milano, Italy*

Diarylethene photoswitches (DAEs) have attracted research attention due to their high applicable potential in many fields including information technology, optoelectronics, imaging, process technology (microfluidic technologies), biosciences, photomechanics and holography [1]. We prepared and investigated in a detail structure-property relationships of a new series of literature rare unsymmetrical benzothiazole-based hexafluorocyclopentene dithienylethenes (DTEs) [2]. The results were compared with the known facts for symmetric diarylethenes (DAEs). We revealed a high photocyclization efficiency which is attributed to a significant shift of the ground state equilibrium to the antiparallel conformation. Barrierless excited state pathway to conical intersection was observed, which remains unperturbed even in polar solvents for most of the prepared DTEs. Furthermore, we uncovered that the rate of back thermal cycloreversion correlates clearly more with the central C–C bond-length in the transition state than with the central C–C bond-length in the ground state of the cyclic form. Finally, our detailed vibrational spectral analysis of the studied DTEs points out significant changes in Raman and infrared spectra during photoswitching cycles, which pave the way for a non-destructive readout of stored information.

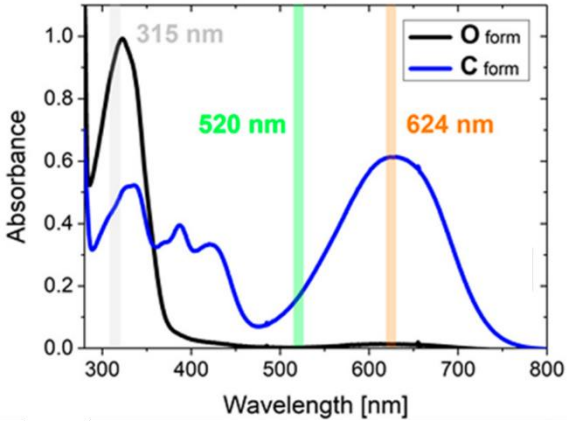


Fig. 1 UV-Vis absorption spectrum of one of the studied DTEs in its open O (black) and closed C (blue) forms (solvent: toluene; vertical lines represent the corresponding irradiation wavelength).

This work was funded by the Slovak Research and Development Agency (APVV-20-0098).

[1] Irie M., Diarylethene Molecular Photoswitches: Concepts and Functionalities, Wiley-VCH, Weinheim, (2021).
[2] Bovoloni M., Filo J., Sigmundová I., Magdolen P., Budzák Š., Procházková E., Tommasini M., Cigáň M., Bianco A.: Phys. Chem. Chem. Phys. 24, 23758 (2022).

4P16
SYNTÉZA A STUDIUM NOVÝCH PŘEPÍNAČŮ NA BÁZI HYDRAZONŮ A JEJICH MODIFIKACE STABILNÍM RADIKÁLEM

Lucie Kotásková[1], Ivan Nemec[1,2], Pawel Jewula[1], Vinicius Santana[1], Petr Neugebauer[1]

[1]*Středoevropský technologický institut, Vysoké učení technické v Brně, 61200 Brno, Česká republika, Lucie.Kotaskova1@ceitec.vutbr.cz*
[2]*Katedra anorganické chemie, Univerzita Palackého, 77900 Olomouc, Česká republika*

Vývoj molekulárních strojů se stal velmi zajímavou a důležitou součástí odvětví molekulární nanotechnologie. Přepínače na bázi azosloučenin jsou jedny z nejhojněji užívaných systémů pro přípravu molekulárních strojů. V tomto příspěvku popisujeme přípravu nového typu azo-přepínačů. Následnou reakcí za účelem vzniku Co(II) komplexu bylo překvapivě zjištěno, že výsledný produkt byl modifikován na jiný zajímavý typ přepínače, odvozeného od hydrazonu. Vzhledem k tomu, že se tento způsob modifikace bohužel nepodařilo reprodukovat, bylo nutno přistoupit k odlišné syntetické strategii (Jappova-Klingemannova reakce), která se ukázala jako méně synteticky i časově náročnou. Tímto způsobem byl připraven hydrazonový přepínač s bromido skupinou, vykazující *E*, *Z*-izomerizaci, kterou je možno indukovat pomocí záření z UV-VIS oblasti anebo změnou pH. Oba izomery byly studovány pomocí NMR a UV-VIS spektroskopie a rentgenové difrakční analýzy. Obdobně byl izolován i hydrazon nesoucí karboxylovou skupinu, který posloužil jako prekurzor pro přípravu radikálového hydrazonového přepínače. Tento radikálový přepínač, který byl analyzován s využitím EPR spektroskopie a rentgenové difrakční analýzy, vykazuje pouze nevratnou izomerizaci, což bylo potvrzeno pomocí UV-VIS spektroskopie. Příprava a studium nových radikálových přepínačů na bázi hydrazonů jsou předmětem právě probíhajícího výzkumu.

Tato práce byla finančně podpořena Grantovou agenturou České republiky, grant č. 22-23760S. Dále byla práce finančně podpořena specifickým vysokoškolským výzkumem na VUT, projekt č. CEITEC VUT-J-23-8383. L.K. děkuje za finanční podporu z programu Brno Ph.D. Talent – financuje statutární město Brno.

PREDNÁŠKY - SEKCIA 5
VYUČOVANIE A HISTÓRIA CHÉMIE

5P01
VYDAVATEĽSKÁ ČINNOSŤ SLOVENSKEJ CHEMICKEJ SPOLOČNOSTI OD ROKU 1942 DO ROKU 2023

Viktor Milata[1], Michal Uher[1]

[1]*Ústav organickej chémie, katalýzy a petrochémie, FCHPT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava; Slovenská chemická spoločnosť, Radlinského 9/1111, 812 15 Bratislava, viktor.milata@stuba.sk*

K základným aktivitám Slovenskej chemickej spoločnosti pri SAV založenej v roku 1929 popri spolkovej činnosti a vzdelávacích aktivitách sa postupom času stala aj vydavateľská činnosť.

Prvou publikáciou bola kniha Ing. S. Stankovianskeho „Krátky prehľad analytickej chémie látok minerálnych, diel I“ vydanou v roku 1942, ktorú nasledovala v roku 1948 vydaná kniha Cement, ktorej autorom bol E. Jirku a v roku 1950 tretia: „Čistenie repnej šťavy redukovanou prísadou vápna na čerenie“ od J. Vašátku. Na ňu nadväzuje Rozvoj chromatografických metód na Slovensku v rokoch 1956-1985 (Prievidza 2009) a Nukleárna analytická chémia a radiačná chémia na Slovensku v rokoch 1957-2009 (Bratislava 2011).

Už v roku 1947 vyšlo prvé číslo prvého slovenského chemického časopisu **Chemické zvesti**. Ich šéfredaktorom bol J. Gašperík a 4 roky ho vydával Spolok chemikov Slovákov. Od roku 1953 ho vydávala SAV a zastrešovala SCHS. V roku 1969 získal časopis podnadpis **Chemical Papers**, ktorý sa stal v roku 1985 hlavným názvom. Po roku 1989 nastali finančno-organizačné problémy s vydávaním časopisu. Od roku 2006 ho prevzala agentúra Versita vo vydavateľstve Springer.

Na komunikáciu s členskou základňou začala SCHS v roku 1970 vydávať **Informačný bulletin** jedenkrát ročne a od roku 1988 dvakrát ročne (www.schems.sk/Archív/ materiálySCHS).

Posledné číslo 51 vyšlo v roku 2004. Jeho pokračovateľom je ChemZi (skratka názvu **Chem**ické **z**vest**i**, https://schems.sk/chemzi/), ktoré začalo vychádzať od roku 2005 dvakrát ročne a teraz už je 23. ročník. Každé štvrté číslo je zároveň zjazdovým zborníkom. Od roku 2023 má názov ChemZi – Chemické zvesti.

Chemistry Europe (predtým ChemPubSoc Europe) je organizácia 16 chemických spoločností z 15 európskych krajín, ktoré zastupujú viac ako 75 000 chemikov. Publikuje rodinu akademických časopisov o chémii, ktoré pokrývajú širokú škálu disciplín. SCHS je jej pridruženým členom a má podiel na ich vydávaní vo vydavateľstve Wiley.

Ďalším typom boli brožúry o význačných slovenských chemikoch, napr. M. Marko, J. Tomko, D. Belluš, E. Kossaczký, M. Jambrich, O. Tomeček ai. Na túto edíciu nadväzuje edícia **Osobnosti FCHPT**, ktorá vychádza za podpory dekanov fakulty a popisuje personálno-pedagogicko-vedecké výsledky profesorov fakulty doplnené o zdravice a spomienky kolegov a priateľov ako aj dokumentovú obrazovú prílohu. Doteraz vyšlo 60 zväzkov. Podobne vznikla aj edícia **Tradícia vedeckej školy na FCHPT I-IV**.

História rozvoja SCHS, či už pred rokom 1993, keď sa Československo rozdelilo, alebo po ňom je zdokumentovaná v brožúrach: 100 let Československé společnosti chemické, její dějiny a vývoj 1866-1966 (Praha 1966), 70 let první pobočky ČSCH založené 26. ledna 1929 v Brne (Brno 1999), Československá společnost chemická, Slovenská chemická spoločnosť 1966-1975 (Praha 1980), Československá společnost chemická, Slovenská chemická spoločnosť pri SAV 1976-1985 (Praha 1987), Slovenská chemická spoločnosť 1986-1995 (Bratislava 1997), Pamätnica 70 rokov Slovenskej chemickej spoločnosti 1929-1999 (Bratislava 2001).

Posledným veľkým vydavateľským počinom v spolupráci s grantovými agentúrami Ministerstva školstva SR VEGA a KEGA je súborné dielo História chemického priemyslu v zrkadle dejín Slovenska vydané v rokoch 2010 – 2021 v úzkej spolupráci s Historickým ústavom SAV a za podpory viacerých subjektov. Celkovo vyšlo 12 dielov v 16 zväzkoch. Bolo ocenené Prémiou za vedeckú a odbornú literatúru za rok 2021 Literárnym fondom.

V prednáške budú prezentované a komentované jednotlivé diela v kontexte doby vzniku, ich historická a dokumentačná hodnota, ako aj odkaz mladej generácie.

Autori ďakujú za podporu Slovenskej chemickej spoločnosti pri SAV (www.schems.sk), vďaka ktorej príspevok vznikol.

[1] Web SCHS: www.schems.sk
[2] Milata V.: osobná zbierka materiálov a dokumentov.

5P02
CHEMIE A DALŠÍ PŘÍRODNÍ VĚDY NA SLEZSKOOSTRAVSKÉM HRADĚ – 17 LET POPULARIZACE V OSTRAVĚ

Martin Mucha[1]

[1]*Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta Ostravská univerzita, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava, martin.mucha@osu.cz*

Chemie, ale také ostatní přírodní a technické vědy dnes nepatří k oblíbeným oborům, avšak odborníci z těchto oblastí na trhu práce chybí. Ostravská pobočka ČSCH ve spolupráci s Přírodovědeckou fakultou Ostravské univerzity, Fakultou materiálově technologickou VŠB-TU Ostrava a dalšími subjekty se již 17 let snaží zlepšit obraz těchto oborů akcí pořádanou na Slezskoostravském hradě. Akce se koná vždy na konci června, podařilo se ji realizovat i za pandemie COVID-19, kdy byla z organizačních důvodů 2 roky přesunuta na začátek září. První ročníky probíhaly po celý den, na základě zkušeností se však čas průběhu akce ustálil na jednom dopoledni, kdy cílovou skupinou jsou především žáci mateřských, základních a středních škol. Akce je však otevřena také široké veřejnosti. Vstup je každoročně zdarma, veškeré náklady je potřeba vždy pokrýt z příspěvků partnerů. Hlavní součástí akce je přírodovědný a technický jarmark se zajímavými chemickými, fyzikálními a biologickými pokusy a soutěže s chemickou a matematickou tématikou. Dále je také možné se seznámit se základy první pomoci případně s hasičskou technikou a vybavením pro zásahy při chemických haváriích. V letošním roce se akce konala 20.6. a dorazilo bezmála 2300 návštěvníků, snad alespoň v některých z nich akce vzbudila zájem o přírodní a technické vědy.

5P03
ANALÝZA FAKTOROV ÚSPECHU V CHEMICKÝCH VÝPOČTOCH: PRÍČINY A DÔVODY VÝSLEDKOV ŠTUDENTOV 1. ROČNÍKA VŠ

Martin Rusek[1], Veronika Machková[2], Dominika Koperová[1], Iveta Bártová[3], Vladimír Sirotek[4], Petr Šmejkal[5], Jitka Štrofová[4]

[1]Pedagogická fakulta, Univerzita Karlova, M. Rettigové 4, 116 39 Praha 1, ČR, domi.koperova@gmail.com
[2]Přírodovědecká fakulta, Univerzita Hradec Králové, Hradecká 1285, 500 03 Hradec Králové III, ČR
[3]Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, tř. 17. listopadu 12, 779 00 Olomouc, ČR
[4]Pedagogická fakulta, Západočeská univerzita v Plzni, Veleslavínova 42, 301 00, Plzeň, ČR
[5]Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Albertov 6, 128 00 Praha 2, ČR

Výskum sa zameriava na komplexné mapovanie schopnosti študentov VŠ riešiť chemické výpočty. Príspevok nadväzuje na predošlý výskum, v ktorom bolo zistené, že medzi najčastejšie problémy študentov patrí ich (ne)schopnosť identifikovať problém či zvoliť a použiť vhodný (matematický) postup [1]. Príspevok je založený na kvalitatívnych metódach analýzy postupu študentov. Pomenúva príčiny úspechu a neúspechu študentov vo výpočtoch: napr. študenti sú úspešní v matematických operáciách, s výnimkou logaritmov pri pH a len ojedinele chybujú pri prevodoch jednotiek či tvorbe vzorcov chemických zlúčenín. Najčastejšie využitou stratégiou sú výpočty pomocou vzorca, najmä dvoch typov výpočtov s najvyššou úspešnosťou (hmotnostného zlomku či koncentrácie), ale v niekoľkých prípadoch dochádza napr. k zámene použitých veličín, a alternatívne stratégie sú využité len zriedka. Zistenia výskumu poukazujú na potrebu zmeny prístupu k vyučovaniu chemických výpočtov a sú impulzom pre zmenu vyučovania na školách.

[1] Rusek, M., Vojíř, K., Bártová, I., Klečková, M., Sirotek, V., Štrofová, J.: *Chimica Slovenica*, 69(2), 371-377 (2022).

5P04
CHEMICKÉ VZDELÁVANIE V KONTEXTE KURIKULÁRNEJ REFORMY

Katarína Kotuľáková[1]

[1]Pedagogická fakulta Trnavskej univerzity v Trnave, Priemyselná 4, P.O.BOX 9, 918 43 Trnava, katarina.kotulakova@truni.sk

Nastupujúca kurikulárna reforma [1] má potenciál významne ovplyvniť vzdelávanie prírodovedného, a teda aj chemického vzdelávania v základných školách na Slovensku. Jej kľúčovým cieľom je rozvoj prírodovednej gramotnosti populácie žiakov, ktorí sa zoznamujú so základnými prírodovednými (chemickými) konceptami a postupmi objektivizovaného skúmania. Nové kurikulum venuje osobitnú pozornosť všetkým trom zložkám prírodovednej gramotnosti – obsahu, procesom aj postojom. Nové štandardy posilňujú činnostný charakter sprístupňovania obsahu, tzv. procesuálny rámec, čo má za cieľ rozvíjať poznávacie postupy, ktoré sú typické pre systematickú a objektivizovanú výskumnú činnosť. Obsah prírodovedného vzdelávania sa koncentruje okolo desiatich kľúčových myšlienok: látky, interakcie, sily, energia, Zem, vesmír, organizmus, ekosystém, dedičnosť a evolúcia. Uvedenou štruktúrou sa koordinujú koncepty jednotlivých prírodovedných predmetov. Postojový rámec sa prejavuje záujmom žiakov o prírodu a javy, ktoré v nej prebiehajú, aktívnym a angažovaným prístupom k prírodným zdrojom, ochrane životného prostredia, klímy a zdravia človeka, tendenciou konať zodpovedne, napr. vo vzťahu k prírodným zdrojom a životnému prostrediu.

Cieľom príspevku je predstaviť logiku výstavby a implementácie vzdelávacích štandardov pre vzdelávaciu oblasť Človek a príroda.

[1] *Štátny vzdelávací program pre základné vzdelávanie*. Verejná konzultácia. (2023, Apríl 13). https://verejnakonzultacia.vzdelavanie21.sk/statny-vzdelavaci-program-pre-zakladne-vzdelavanie/

5P05
EXPEDÍCIA: VČERA ALTERNATÍVNE, ZAJTRA BEŽNÉ UČEBNICE CHÉMIE

Ľubomír Held[1]

[1]Trnavská univerzita v Trnave, 918 43 Trnava, Hornopotočná 23, lubomir.held@truni.sk

Ako bude vyzerať učebnica budúcnosti? To je otázka, na ktorú asi v našom príspevku nedáme

odpoveď, ale pokúsime sa predstaviť učebnice, ktoré by, ako dúfame, mohli zohrať úlohu pri realizácii nového kurikula pre základnú školu v praxi. Funkcia učebnice sa v súčasnosti radikálne mení. Už z nej netreba študovať, na zvládnutie písomky postačia odpovede z internetu, no a umelá inteligencia píše slohové práce, referáty, kratšie seminárky a žiacke projekty. Keď hľadáme nový typ učebnice, vychádzame z predpokladu, že musí nútiť žiaka pracovať, rozmýšľať, poznávať. Nemusí byť encyklopédiou a dokonca nemusí byť ani v „súlade“ s najnovším vedeckým poznaním.

V prednáške chceme predstaviť kompletnú sériu učebníc chémie pre základnú školu, ktorú možno charakterizovať prívlastkami: pracovná, induktívna, konštruktivistická, skĺbujúca históriu a súčasnosť, teóriu a prax, empirické a „digitálne“ poznávanie, zdôrazňujúca dokonalé osvojenie nosných pojmov a odstraňujúca prvky utajeného poznania. Učebnice boli vyvíjané ako alternatívne [1-3], ale dnes nadobúdame presvedčenie, že by sa mohli uplatniť ako návody pre učiteľov ako realizovať nové kurikulum v predmete chémia. Dva diely sú už preložené do češtiny [4] a distribuované v elektronickej aj papierovej forme. Vyučovanie podľa týchto učebníc podporila pomôckami aj skupina mladých vedcov zo SAV prostredníctvom projektu podporujúceho experimentálnu činnosť žiakov.

Príspevok bol podporený projektom VEGA 1/006/21 Výskum spôsobilostí učiteľov prírodovedných predmetov v nižšom sekundárnom vzdelávaní.

[1] Held, Ľ, Bronerská, J., Kotuľáková, K., Kováčová, L., Orolínová, M.: *ExpEdícia skús, skúmaj, spoznaj. Chémia – Pracovná učebnica pre 7.ročník ZŠ a sekundu osemročných gymnázií.* Indícia, s.r.o., Bratislava, 2. prepracované vydanie. ISBN: 978 80 89859597 (2021).

[2] Held, Ľ, Bronerská, J., Koperová, D., Kotuľáková, K.: *ExpEdícia skús, skúmaj, spoznaj. Chémia – Pracovná učebnica pre 8.ročník ZŠ a terciu osemročných gymnázií.* Indícia, s.r.o., Bratislava, 2. prepracované vydanie. ISBN: 978 80 8985959 90 0 (2023).

[3] Held, Ľ, Kotuľáková, Orolínová, M., K., Bronerská, J., Koperová, D.: *ExpEdícia skús, skúmaj, spoznaj. Chémia – Pracovná učebnica pre 9.ročník ZŠ a kvartu osemročných gymnázií.* Indícia, s.r.o., Bratislava, 1. vydanie. ISBN: 978 80 8985959 90 0 (2023).

[4] Held, Ľ, Bronerská, J., Kotuľáková, K., Kováčová, L., Orolínová, M.: *.ExpEdice - CHEMIE pracovní učebnice A - elektronická verze.* https://www.h-edu.cz (citované 28.6. 2023)

PREDNÁŠKY - SEKCIA 6
APLIKOVANÁ CHÉMIA, ŽIVOTNÉ PROSTREDIE A POLYMÉRY

6P01
VYUŽITIE FERMENTÁCIE JABLKOVÝCH VÝLISKOV NA ZVÝŠENIE OBSAHU POLYFENOLOV

František Kreps[1], Mária Greifová[1], Mária Jedináková[1], Zuzana Krepsová[1]

[1]*Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 15 Bratislava, frantisek.kreps@stuba.sk*

Práca sa venuje zušľachteniu jablkových výliskov ako odpadu vznikajúceho pri výrobe jablkového džúsu. Jablkové výlisky obsahujú mnoho biologicky významných látok [1]. Zvyčajne sa jablkové výlisky používajú ako zložka krmiva pre zvieratá, ale sú známe mnohé biotechnologické aplikácie zamerané na získavanie cenných látok z výliskov. Najviac publikácií sa zaoberá práve získavaním pektínu, ktorý sa v jablkových výliskoch nachádza v 10 – 15 % zastúpení. Extrahovaný pektín má najčastejšie využitie v potravinárskom a kozmetickom priemysle, ako želírujúce alebo zahusťovacie činidlo [1, 2]. V práci sme sa zamerali na menej frekventovaný výskum zvýšenia polyfenolov z jablkových výliskov, fermentáciou v tuhom stave s vláknitou hubou *Aspergillus niger*. V tejto publikácií sa venujeme celkovému obsahu polyfenolov vo fermentovaných výliskoch s *Aspergillus niger* a s autochtónnou (pôvodnou) mikroflórou v tretí a siedmy deň inkubácie pri 30 °C oproti nultému dňu. S pribúdajúcim časom fermentácie sme zaznamenali nárast obsahu polyfenolov. Výlisky fermentované sedem dní s *Aspergillus niger* obsahovali 1471 mg GAE/100 g sušiny, čo je 7,5 krát viac ako výlisky pred fermentáciou a 4,1 krát viac ako výlisky fermentované autochtómnou

mikroflórou. V jablkových výliskoch fermentovaných *Aspergillus niger* sme identifikovali eriodiktyol, významnú biologickú aktívnu látku, ktorej obsah v posledný deň odberu vzorky bol 639 mg/100 g sušiny.

Táto práca bola podporená Slovenskou vedeckou grantovou agentúrou VEGA pre projekty 1/0141/23. Táto publikácia vznikla vďaka podpore Operačného programu Integrovaná infraštruktúra pre projekt Dopytovo-orientovaný výskum pre udržateľné a inovatívne potraviny, Drive4SIFood, 313011V336 spolufinancovaný zo zdrojov Európskeho fondu regionálneho rozvoja.

[1] Waldbauer, K., McKinnon, R., Kopp, B.: *Planta Med. 83,* 12/13 (2017).
[2] Calvete-Torre, I., Munoz-Almagro, N., Pacheco, M.T., Antón, M.J., Dapena, E., Ruiz, L., Margolles, A., Villamiel, M., Moreno, F.J.: *Carbohydr. Polym. 264,* (2021).

6P02
VYUŽITIE RAKYTNÍKOVEJ ŠŤAVY NA PRÍPRAVU FERMENTOVANÝCH OVOCNÝCH NÁPOJOV

Zuzana Krepsová[1], Mária Greifová[1], Svetlana Schubertová[1], František Kreps[1]

[1]*Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 15 Bratislava, zuzana.krepsova@stuba.sk*

Jedným z dôvodov, prečo nie je rakytníková šťava, napriek vysokému obsahu zdraviu prospešných látok, zakomponovaná do jedálnička ľudí vo väčšej miere, je jej kyslá až adstringentná chuť. Tá je spôsobená vysokým obsahom kyseliny jablčnej, nízkym pH a nízkym pomerom obsahu cukrov a kyselín [1]. Jednou z možností ako pozmeniť senzoricky neatraktívne vlastnosti rakytníkovej šťavy je jej fermentácia, ktorá je vhodnou alternatívou k sladeniu a zároveň pri nej nedochádza k degradácii termicky labilných nutrientov a nežiadúcej zmene farby [2]. Jablčno-mliečna fermentácia predstavuje enzymatickú dekarboxyláciu chuťovo výraznej kyseliny jablčnej za vzniku lahodnejšej kyseliny mliečnej [1]. Sledovaním rastu 11 mikrobiálnych kultúr sme za mikroorganizmus najvhodnejší pre rast v rakytníkovej šťave označili *Lactobacillus plantarum*. Najlepšie podmienky pre priebeh jablčno-mliečnej fermentácie baktériou *Lactobacillus plantarum* sme dosiahli kombináciou rakytníkovej a jablčnej šťavy v pomere 2:3.

Táto práca bola podporená Slovenskou vedeckou grantovou agentúrou VEGA pre projekty 1/0141/23. Táto publikácia vznikla vďaka podpore Operačného programu Integrovaná infraštruktúra pre projekt Dopytovo-orientovaný výskum pre udržateľné a inovatívne potraviny, Drive4SIFood, 313011V336 spolufinancovaný zo zdrojov Európskeho fondu regionálneho rozvoja.

[1] Markkinen, N., Laaksonen, O., Nahku, R., Kuldjärv, R., Yang, B.: *Food Chem. 286,* (2019).
[2] Martinsen, B. K., Aaby, K., Skrede, G.: *Food Chem. 316,* (2020).

6P03
VYUŽITÍ MONOMERŮ Z ROSTLINNÝCH OLEJŮ V SYNTÉZE AKRYLÁTOVÝCH LATEXŮ PRO LAKAŘSKÉ APLIKACE

Martin Kolář[1], Jana Machotová[1], Štěpán Podzimek[1,2], Jan Honzíček[1], Martin Hájek[1]

[1]*Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice, st51413@student.upce.cz*
[2]*SYNPO, a. s., S. K. Neumanna 1316, 532 07 Pardubice*

V současné době se zvyšuje snaha nahrazovat fosilní zdroje jejich obnovitelnými alternativami. Tyto snahy zasahují všechna průmyslová odvětví, včetně polymerů a nátěrových hmot [1]. Obnovitelné alternativy jsou nejen ekologicky přívětivější, ale v některých případech mohou propůjčit finálním produktům užitečné vlastnosti, vycházející z jejich často velmi odlišné struktury. V této práci byly z výchozích rostlinných olejů transesterifikací, epoxidací a následnou akrylací připraveny akrylované monomery, kterými byly následně částečně nahrazeny monomery z fosilních zdrojů v syntéze akrylátových latexů technikou semi-kontinuální emulzní polymerace [2]. Zavedení těchto monomerů do polymerního řetězce bylo následně zkoumáno pomocí infračervené spektroskopie. Stanovení molekulové hmotnosti technikou separace v asymetrickém tokovém poli v kombinaci s víceúhlovým rozptylem světla prokázalo vznik vysokomolekulárních struktur. Tento jev byl pozorován zejména u biomonomerů z olejů obsahujících vyšší podíly polynenasycených kyselin (linolové a linolenové). Vlastnosti nátěrových filmů, připravených z jednotlivých kopolymerů, byly následně hodnoceny z hlediska tvrdosti, lesku a odolnosti vůči vodě. Vlastnosti těchto nátěrových filmů byly srovnatelné, v některých ohledech i lepší než v případě referenčního latexu, připraveného z běžných monomerů z fosilních zdrojů, což činí rostlinné

oleje atraktivní alternativou pro produkci udržitelných materiálů v odvětví nátěrových hmot.

[1] Biswas, A., Roy, M.: *J. Cleaner Prod.* 87, 463–468 (2015).
[2] Demchuk, Z., Shevchuk, O., Tarnavchyk, I., Kirianchuk, V., Lorenson, M., Kohut, A., Voronov, S., Voronov, A.: *ACS Omega. 1*, 1374–1382 (2016).

6P04
TIŠTĚNÉ INDIKÁTORY PRO CHYTRÉ POTRAVINOVÉ OBALY

Vojtěch Dobiáš[1], Denisa Filipi[1], Mária Veselá[2], Michal Veselý[1]

[1]*Ústav fyzikální a spotřební chemie, Fakulta chemická, Vysoké učení technické v Brně, Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, vojtech.dobias@vut.cz*
[2]*Ústav chemie potravin a biotechnologií, Fakulta chemická, Vysoké učení technické v Brně, Purkyňova 464/118, 612 00 Brno*

Tato práce pojednává o tématu tištěných indikátorů plynů pro chytré potravinové obaly. Využití diskutovaných indikátorů spočívá v jejich schopnosti reagovat na změnu koncentrace obsahu plynů v potravinovém obalu barevným přechodem. Vizuální vyhodnocení indikátorů je jejich klíčovou vlastností, neboť umožňuje spotřebiteli vyhodnotit indikátor bez jakékoliv instrumentace [1].

Řada plynů se vytváří v průběhu kažení potravin a akumuluje se v potravinovém obalu [2]. Některé plyny jsou však záměrně do potravinových obalů zaváděny. Takovým případem je balení v modifikované atmosféře. U vakuově balených potravin je snaha o téměř úplné odstranění plynů v obalu.

Diskutovaný indikátor kyslíku je založen na fotokatalytické redukci barviva, které v redukované formě reaguje s kyslíkem, který barvivo oxiduje zpět do původní barvy. Indikátor byl vytištěn pomocí sítotisku a Bakerova pravítka na PET folii. Tento indikátor by mohl nalézt využití u potravin balených v modifikované atmosféře či u potravin balených vakuově, kde by mohl indikovat porušení potravinového obalu.

Indikátor aminů by naopak mohl varovat spotřebitele před zkaženou potravinou. Kompozice aminového indikátoru byla nanesena na podložku a vysušena. Indikátor aminů byl testován na butylamin. V definovaných časových intervalech bylo vláknovým spektrofotometrem prováděno měření. Z naměřených $L^*a^*b^*$ hodnot byla barevná změna vizualizována.

Tento výzkum byl podpořen projektem OP PIK–Aplikace CZ.01.1.02/0.0/0.0/20_321/0024435 financovaný Ministerstvem průmyslu a obchodu České republiky.

[1] Ding L., Li X., Hu L., Zhang Y., Jiang Y., Mao Z., Xu H., Wang B., Feng X., Sui X.: *Carbohydr. Polym.* 233 (2020).
[2] Bekhit A., Holman B., Giteru S., Hopkins D.: *Trends Food Sci Technol.* 109 (2021).

6P05
POLYMERNÍ VEKTORY NA BÁZI DIBLOKOVÝCH HYDROLYTICKY ŠTĚPITELNÝCH POLYKATIONTŮ PRO DORUČOVÁNÍ GENŮ

Eliška Hrdá[1,2], Richard Laga[2], Ladislav Androvič[2]

[1]*Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy, Albertov 2038/6, 128 00, Praha, hrdael@natur.cuni.cz*
[2]*Ústav makromolekulární chemie Akademie věd ČR, v. v. i., Heyrovského nám. 2, 160 00, Praha*

Genová terapie představuje slibný terapeutický přístup umožňující kauzální léčbu mnoha typů závažných onemocnění. Praktické použití nativních nukleových kyselin (NK) kódujících terapeutické proteiny je však omezeno jejich rychlou enzymatickou degradací v tělních tekutinách a nízkou efektivitou penetrace přes buněčné membrány. Je proto žádoucí vyvinout dopravní systém (vektor) schopný efektivně doručit a následně uvolnit geny v intracelulárním prostředí cílových buněk, což bylo i předmětem této studie. Zaměřili jsme se na vývoj nových typů syntetických vektorů na bázi di-blokových polykationtů připravených pomocí RAFT polymerizace. Kladně nabitý blok vektoru tvořily monomerní jednotky methakrylamidového typu mající ionizovatelné skupiny (např. amoniová či fosfoniová skupina) přichycené k hlavnímu polymernímu řetězci prostřednictvím spojek obsahujících pH-senzitivní hydrazonové vazby. Do struktury některých kladně nabitých bloků bylo navíc zabudováno ~20 mol. % jednotek hydrofobního komonomeru *N*-butylmethakrylamidu pro zvýšení internalizace vektoru. Druhý blok vektoru sestával z hydrofilního elektroneutrálního polymeru – *N*-(2-hydroxypropyl)methakrylamidu nebo 2-methakryloyloxyethylfosforylcholinu. Připravené polykationtové vektory byly poté elektrostaticky komplexovány s NK za vzniku „core-shell“ nanočástic. Polykationtové vektory byly charakterizovány pomocí SEC, tvorba komplexů byla sledována elektroforézou a hydrodynamické velikosti a zeta-potenciály komplexů byly

stanoveny metodou DLS. Velikosti připravených komplexů se pohybovaly v rozmezí 75–585 nm v závislosti na typu použitého vektoru. Podle předběžných výsledků nejlépe komplexovaly DNA polykationty s kvartérními skupinami.

6P06
STARNUTIE A MOŽNOSTI OCHRANY POLYURETÁNOVÝCH MATERIÁLOV V ZBIERKACH KULTÚRNEHO DEDIČSTVA

Radko Tiňo[1], Lenka Lopatková[1], Katarína Vizárová[1], Simona Klempová[1], Soňa Malečková[1]

[1]ODCP FCHPT STU, Radlinského 9/1111, 812 15 Bratislava, radko.tino@stuba.sk

Zbierky súčasného umenia sú do značnej miery tvorené syntetickými polymérnymi materiálmi, pričom jedným z najviac zastúpených typov sú polyuretány (PU), ktoré sa od 60. rokov minulého storočia stali objektom záujmu umelcov a dizajnérov. Ich ochrane bola venovaná iba malá pozornosť, pretože až do konca 20.storočia boli považované za stabilné. PU predstavujú širokú skupinu polymérov, od tvrdých plastov, cez vlákna a peny, až po mäkké elastoméry. Ich mnohostranné využitie priťahovalo umelcov a dizajnérov, ktorí ich používali na výrobu sôch, obrazov, dizajnového nábytku, textílií a doplnkov. Mäkké PU peny, ktoré sú predmetom tohoto príspevku, sú tvorené z malého percenta pevným materiálom a zvyšok tvoria otvorené póry vyplnené vzduchom, čo spôsobuje, že sú ľahko prístupné degradácii kyslíkom, oxidácii na svetle a hydrolýze pôsobením vzdušnej vlhkosti. S cieľom preveriť účinnosť konsolidantov pri urýchlenom tepelnom a svetelnom starnutí PU mäkkej peny bol navrhnutý experiment s využitím esterovej a éterovej PU peny. Zmeny vlastností vzoriek boli pozorované mikroskopicky, kolorimetricky a pomocou FTIR spektroskopie. Na základe výsledkov experimentu je zrejmé, že miera degradácie PU pien je vyššia pri urýchlenom svetelnom starnutí ako pri tepelnom starnutí. Boli identifikované základné funkčné skupiny, na ktorých dochádza k zmenám vplyvom urýchleného starnutia. Bol preverený aj vplyv dvoch rôznych druhov konsolidantov na predĺženie životnosti testovaných mäkkých PU pien.

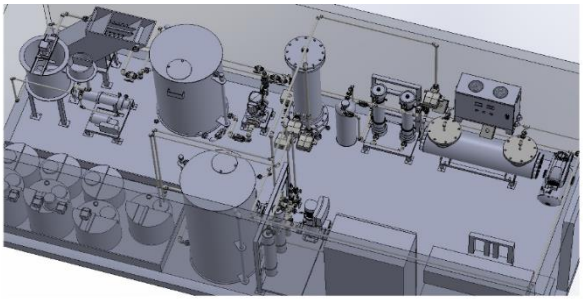
Táto práca vznikla s finančnou podporou projektu: APVV-20-0410, Ochrana a konzervovanie novodobých objektov kultúrneho dedičstva s obsahom plastov PolArt.

6P07
APLIKACE POKROČILÝCH OXIDAČNÍCH PROCESŮ DO TECHNOLOGIE ÚPRAVY A ČIŠTĚNÍ PROCESNÍCH VOD V MODULÁRNÍ ČISTÍRNĚ

Libor Dušek[1]

[1]Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 95, Pardubice 532 10, Czech Republic, libor.dusek@upce.cz

Současné mechanicko-biologické čistírny odpadních vod (ČOV) často nemohou léčiva, produkty osobní péče, agrochemikálie a řadu dalších oraganických produktů odstranit s dostatečnou účinností. Potenciálně perspektivním řešením tohoto problému mohou být pokročilé procesy úpravy (ATP) odpadních komunálních a průmyslově procesních vod. Ty jsou založeny na vhodné kombinaci polutant koncentrujícího procesu, jako je např. koagulace-flokulace-srážení, stripování, filtrace (všechny typy), iontové výměny, absorpce, elektroflotace, s pokročilým oxidačním procesem [1, 2]. Ten zajistí parciální oxidaci či totální mineralizaci organického polutantu na vodu a oxid uhličitý. Práce je věnována popisu a aplikaci poloprovozní ČOV, viz Obr. 1., jež byla koncipovaná jako sekvence technologických modulů čiření, filtrace, sorpce, ultrafiltrace, fotokatalytické oxidace pomocí UVC záření či elektrochemické oxidace a reverzní osmózy (nanofiltrace) [3]. Podle potřeby konkrétního průmyslového provozu, respektive dle požadované kvality výstupní vody, je možné jak využití dílčích technologických operací konkrétních modulů, tak i jejich vzájemná simultánní součinnost.



Obr. 1 Celkový pohled na modulární poloprovozní ČOV.

[1] Dušek, L., Horňáková, B.; NOVOTNÝ, L. Oxidovadla na bázi chloru při úpravě odpadních vod nepřímou elektrooxidací. Chemické listy 106 (11), 1054 (2012).

[2] Palarčík, J., Krupková, O., Peroutková, P., Malaťák, J., Velebil, J., CHýlková, J., Dušek, L.: Catalysts.12, 6, (2022).
[3] Kuchtová, G., Herink, P., Herink, T., CHýlková, J., Mikulášek, P., Dušek, L.: Process Saf. Environ. Prot. 171, 834 (2023).

6P08
MODIFIKOVANÉ POLYMERY: NÁPLNĚ KOLON PRO SELEKTIVNÍ SORPCE A REAKCE V PRŮTOČNÉM USPOŘÁDÁNÍ

Martin Kocúrik[1], Jaroslav Pochobradský[1], Jan Bartáček[1], Miloš Sedlák[1], Jan Svoboda[1]

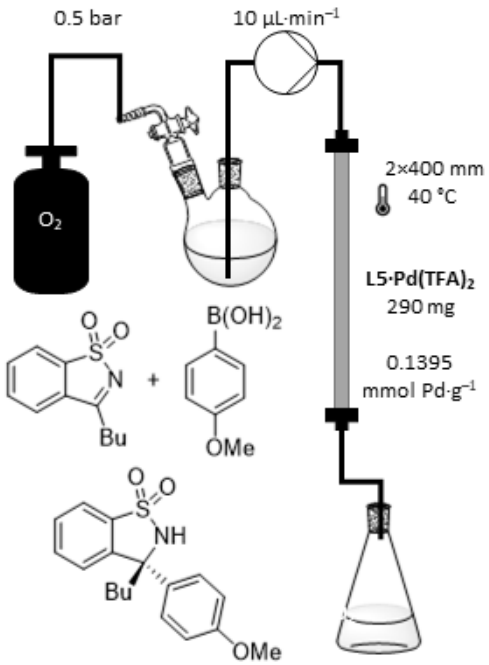
[1]Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, jan.svoboda@upce.cz

Přechod od vsádkových reaktorů k průtočným je vzhledem k nesporným výhodám tohoto uspořádání do budoucna nevyhnutelný. Výroby aktivních farmaceutických substancí by měly být postupně převedeny do kontinuálních procesů zejména z důvodu lepší kontroly kvality.

Prezentovaný příspěvek shrnuje úspěšnou konstrukci dvou kolon s polymerní náplní pro průtočné uspořádání. V prvním případě je kolona použita k selektivnímu vychytávání růstových stimulátorů rostlin (kontinuální selektivní adsorbér) [1]. Ve druhém případě je pak kolona použita ke kontinuální asymetrické syntéze benzosultamů (kontinuální selektivní reaktor) [2].

Průtočné uspořádání je srovnáno se vsádkovým. Konstrukce kolon je diskutována zejména z hlediska použitého průtoku a tlaku. Dále pak z hlediska možné regenerace a znovupoužití.

V případě použití kolony jako průtočného reaktoru (Obr. 1) se jednalo o třífázový systém. V pevném modifikovaném polymeru (katalyzátor) reagovaly dvě pevné látky rozpuštěné v kapalném rozpouštědle a dále plynný kyslík rovněž absorbovaný v rozpouštědle.



Obr. 1 Schematické znázornění studovaného průtočného systému

Bylo zjištěno, že zásadní vliv na účinnost kolony má botnavost polymeru použitého jako náplň. Dále pak použité rozpouštědlo. Pro aktivní a reprodukovatelnou difúzi reaktantů do katalyzujícího polymeru je dále nutné udržovat polymer nabotnalý a zamezit jeho vyschnutí.

Autoři děkují Univerzitě Pardubice za institucionální finanční podporu.

[1] Kocúrik M., Bartáček J., Svoboda J., Kolská Z., Chýlková J., Sedlák M.: *Polymer 256*, 125189 (2022).
[2] Kocúrik M., Bartáček J., Drabina P., Váňa J., Svoboda J., Husáková L., Finger V., Hympánová M., Sedlák M.: *Odesláno do redakce* (2023).

6P09
VYBRANÉ KOMPLEXY PŘECHODNÝCH KOVŮ VYUŽITELNÉ JAKO KATALYZÁTORY PRO VYTVRZOVÁNÍ NENASYCENÝCH POLYESTEROVÝCH PRYSKYŘIC

Eliška Matušková[1], Jan Honzíček[1], David Rubeš[1], Jan Vinklárek[2]

[1]Ústav chemie a technologie makromolekulárních látek, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, studentská 573, 532 10 Pardubice, eliska.matuskova@student.upce.cz
[2]Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice

Vybrané komplexy přechodných kovů jsou studovány jako urychlovače pro nenasycené

polyesterové pryskyřice. Ty nacházejí své uplatnění v mnoha odvětvích, zejména jako kompozitní materiály. Aby bylo dosaženo požadovaných vlastností materiálu, je nutné do systému přidat takový urychlovač, který zajistí rychlé a účinné vytvrzení nenasycených polyesterových pryskyřic.

Komplexy přechodných kovů nabízejí výborné katalytické vlastnosti pro urychlení vytvrzení. Připravují se reakcí přechodného kovu, jako je například kobalt, železo či vanad, s organickými ligandy. Mezi nejpoužívanější urychlovače se řadí 2-ethyl hexanoát kobaltnatý. V posledních letech se setkáváme s požadavky na jeho nahrazení. Důvodem je jeho potenciální karcinogenita. Proto je kladen na výzkum stále větší tlak na to, aby byla nalezena vhodná alternativa se stejným, v ideálním případě ještě lepším účinkem.

V naší studii jsme si zvolili urychlovače na bázi železa a vanadu, jejichž aktivita byla studována ve formě jak komerčně dostupných, tak i *in-house* syntetizovaných sloučenin. Jako reference byl použit standartní urychlovač na bázi kobaltu. Jejich účinky byly studovány na komerčním systému UP/STY/MEKP doporučeným výrobcem, aby byly zachovány identické podmínky vytvrzování.

Tato práce vznikla za podpory Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (UPA SG5_2023_004).

6P10
TRIETHYLAMINE AS A HIGHLY EFFICIENT CATALYST FOR THE CHEMICAL IMIDIZATION OF POLYIMIDES

Zuzana Frances Šimonová[1,2], Jana Machotová[1], Pavel Šimon[1,2], Jiří Zelenka[2]

[1]*Institute of Chemistry and Technology of Macromolecular Materials, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentská 573, 53210, Pardubice, Czech republic, st51494@upce.cz*
[2]*TOSEDA s.r.o., U Panasonicu 376, 53006, Staré Čívice, Czech republic*

Polyimides (PI) are group of polymers with excellent properties including thermo-oxidation stability, radiation resistance, and excellent mechanical properties. They are used as advanced materials in optoelectronics, biomedicine, sensors and many other applications. Typically, polyimides are synthesized through a two-step reaction. In the first step, a polyamic acid (PAA) is prepared by the reaction of diamine and dianhydride. The PAA is then converted into polyimide via intramolecular cyclization (imidization) in the second step. Imidization can be performed thermally at high temperatures (>300 °C) or chemically using catalysts. For chemical imidization, three catalysts– triethylamine (TEA), quinoline (QL), and 1,4-diazabicyclo(2.2.2.)octane (DABCO), and three different temperatures (120 °C, 140 °C, and 160 °C) were selected. The progress of the chemical imidization reaction was monitored using nuclear magnetic resonance and infrared spectroscopy techniques. Thermal, mechanical, and optical properties of the prepared polyimides were compared with polyimides synthesized via thermal imidization. Polyimide films transparent in the visible region and possessing favorable mechanical properties and thermal stability were prepared via chemical imidization using the triethylamine catalyst at the reaction temperature of 160 °C. Thanks to these results, chemical imidization appears to be a great alternative to thermal imidization.

6P11
VLIV TYPU A MODIFIKACÍ POLYSACHARIDOVÝCH NANOKRYSTALŮ NA STRUKTURU A VLASTNOSTI NANOKOMPOZITU S MATRICÍ PCL/PLA

Ivan Kelnar, A. M. Abdel-Mohsen

Ústav makromolekulární chemie AVČR, v.v.i., Heyrovského n. 2, 16200 Praha 6, kelnar@imc.cas.cz

Vlastnosti biodegradovatelných polymerů lze zlepšit jejich blendováním a současnou aplikací organických nanočástic, což v řadě případů vede k synergickým efektům díky kombinaci efektivních struktur a vyztužení. U směsí tuhé křehké kyseliny polylaktonové (PLA) a elastického poly ε-kaprolaktonu jsme studovali komplexní vliv modifikovaných celulózových nanokrystalů (CNC) a chitinových nanowhiskrů (CNW) na jejich parametry. V případě CNC a CNC potaženého polydopaminem byla zjištěna významná závislost účinku nanoplniv na složení a postupu míchání, což vedlo k současnému zlepšení základních mechanických vlastností zejména u systémů s PLA matricí a naopak k eliminaci vyztužujícího účinku u kompozitů s bikontinuelní strukturou. Důvodem je podstatné ovlivnění dynamické asymetrie a změny kontinuity obou komponent včetně lokalizace subinkluzí v kontinuálních fázích. U samotného

polydopaminem modifikovaného CNC bylo pozorováno samouspořádání do nanovláken, jeho aplikace v nanokompozitu vedla k vyšší tepelné stabilitě. V případě CNW byl studován vliv stupně deacetylace, tj. obsahu primárních aminů na vlastnosti a stabilitu. Byl zjištěn velmi podobný vliv primárních a sekundárních aminů na stěpení řetězců polyesterů a tím i na strukturu a tepelnou stabilitu. Z výsledů je zřejmý zásadní vliv struktury a obsahu bikontinuelních fází na mechanické vlastnosti. Kombinace různého postupu míchání a funkcionality resp. modifikace organických nanoplniv je účinným nástrojem pro řízení vlastností biodegradovatelného nanokompozitu

Práce vznikla s podporou Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (Grant LUAUS23004).

PREDNÁŠKY - SEKCIA 7 CHEMPROGRESS – CHEMICKÉ TECHNOLÓGIE

7P01 VLIV PŘEDÚPRAVY MEMBRÁNY A VODIVOSTI KATALYZÁTORU NA VÝKON ALKALICKÉ ELEKTROLÝZY VODY S ANIONTOVĚ SELEKTIVNÍ MEMBRÁNOU

Michaela Plevová[1], Jaromír Hnát[1], Jan Žitka[2], Karel Bouzek[1]

[1]*Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav anorganické technologie, Technická 5, 166 28 Praha 6, ČR, plevovamscht.cz*
[2]*Tailromem s.r.o., Zájezd 8, 273 43 Zájezd, ČR*

Vodík může sehrát důležitou roli v dekarbonizaci energetiky, průmyslu a dopravy, kde může být využit jako zdroj energie, vstupní surovina v chemickém průmyslu či pro výrobu syntetických paliv. Vodík může být vyroben šetrně k životnímu prostředí elektrolýzou vody s využitím elektrické energie z obnovitelných zdrojů.

Alkalická elektrolýza vody s aniontově selektivní membránou (MAEV) představuje vhodnou metodu pro výrobu vodíku, jelikož umožňuje použití levných konstrukčních a katalytických materiálů (např. nikl, železo) a zároveň dosažení bezpečného a flexibilního procesu. Další výhodou MAEV představuje možnost aplikace katalyzátoru přímo na povrch membrány (CCM – z angl. Catalyst Coated Membrane), která zlepšuje využití katalyzátoru. Pro alkalické prostředí však není přístup CCM běžně využívaný, a proto je nutný další výzkum a vývoj.

Cílem této práce je dosažení zlepšení výkonu a stability MAEV za použití přístupu CCM. Toho bude dosaženo vhodnou předúpravou membrány a zvýšením vodivosti katalytické vrstvy.

Pro přípravu CCM bude použita membrána složená z blokového kopolymeru s 1,4-diazabicyklo[2.2.2]oktanovými funkčními skupinami. Budou použity neplatinové katalyzátory na bázi $NiCo_2O_4$ a $NiFe_2O_4$ společně s aniontově selektivním polymerním pojivem.

Získané výsledky naznačují, že s optimali–zovanou CCM je možné dosáhnout zlepšení výkonu MAEV.

Financováno za podpory Technologické agentury České republiky v rámci projektu č. TK 02030001.

7P02 POLYBENZIMIDAZOLE BASED SEPARATOR FOR ALKALINE MEMBRANE WATER ELECTROLYSIS

Kateřina Hradečná[1], Jaromír Hnát[1], Karel Bouzek[1]

[1]*Departure of Inorganic Technology, University of Chemistry and Technology Prague, Technická 5, 166 28, Praha 6, hradecnk@vscht.cz*

Alkaline membrane water electrolysis (AMWE) has emerged as promising technology for highly efficient hydrogen production. Instead of porous separators, which are used in industrial alkaline water electrolysis, AMWE utilizes thin polymeric ion-conducting membranes. The low thickness of membranes together with zero-gap cell arrangement minimalize the ohmic loss and improves the energy efficiency of AMWE. Suitable membranes for AMWE can be divided into two categories: i) anion-exchange membranes (AEMs) and ii) ion-solvating membranes (ISMs). Anion-exchange membranes allow AMWE to operate with diluted KOH electrolytes due to the selective transport of OH^- between electrodes. Unfortunately, because of degradation of fixed functional groups, AMWE with anion-exchange

membrane is limited by temperature. In contrast of AEMs, ion-solvating membranes excels with their temperature stability due to the absence of functional groups in their polymeric chain. Because of their impressive temperature and mechanical durability, ISMs made of polybenzimidazole (PBI) and its derivates have great potential for utilization in AMWE.

The aim of this work is to characterize a polybenzimidazole based ion-solvating membrane for alkaline membrane water electrolysis. Composition, dimensional changes, and temperature dependence of ionic conductivity were measured to understand the influence of these parameters on AMWE.

This work was supported from the grant of Specific university research – grant No A2_FCHT_2023_079.

7P03
VLIV TYPU SEPARÁTORU NA PROVOZ ALKALICKÉHO ELEKTROLYZÉRU VODY PŘI NÍZKÝCH KONCENTRACÍCH KAPALNÉHO ELEKTROLYTU

Karel Denk[1], Roman Kodým[1], Jaromír Hnát[1], Martin Paidar[1], Karel Bouzek[1]

[1]*Ústav anorganické* technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6 – Dejvice, denkk@*vscht.cz*

Alkalická elektrolýza vody (AEV) představuje způsob elektrolytické výroby vodíku používaný více než 100 let. Naprostá většina vodíku je však stále vyráběna z fosilních paliv. Zároveň se v poslední době klade vyšší důraz na zvyšování účinnosti a ekologičnosti energetických procesů, například zaváděním obnovitelných zdrojů energie (OZE), které mají ovšem nestálou produkci. Elektrolýza vody ve spojení s OZE představuje proces, který může vyrábět vodík s minimální produkcí oxidu uhličitého. I proto se v posledních dvou desetiletích výzkum zaměřuje na další zefektivnění AEV.

K nejzásadnějšímu vývoji dochází u separátoru elektrodových prostor AEV cely. Namísto tradiční porézní diafragmy se vyvíjí polymerní iontově-selektivní pevné elektrolyty (ISM), které jsou dostatečně vodivé i při použití zředěných roztoků KOH a nižších provozních teplot. Použití ISM tak umožňuje dosáhnout stejných či lepších výsledků oproti konvenční AEV s diafragmou při zvýšení flexibility a bezpečnosti.

Prezentovaná práce se zaměřuje na porovnání zmíněných dvou typů separátorů v AEV při použití nízkých koncentrací kapalného elektrolytu. V případě AEV s diafragmou byla při nízkých koncentracích KOH pozorována limitace přenosem hmoty. Experimentálně i s pomocí navrženého 1D matematického modelu popisující tyto dva systémy bylo prokázáno, že hlavní příčina pozorované limitace spočívá v pomalém transportu iontů diafragmou z důvodu nízké vodivosti kapalného elektrolytu.

Tento výzkum byl financován z projektu Technologické agentury jako součást projektu číslo TK02030103. Tento výstup vznikl v rámci projektu European Union's Horizon 2020 research and innovation programme (GA No. 862509).

7P04
VIACZLOŽKOVÉ Ni-Fe-W KATALYZÁTORY PRE ZERO-GAP ALKALICKÚ ELEKTROLÝZU VODY

Jana Záchenská, Matilda Zemanová

Fakulta chemickej a potravinárskej technológii STU v Bratislave, Oddelenie anorganickej technológie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, jana.zachenska@stuba.sk

Energia je neodmysliteľnou súčasťou dnešného sveta a s vývojom technológií sa jej dopyt neustále zvyšuje. Primárnymi zdrojmi energie sú fosílne palivá. Pri ich spaľovaní vzniká veľké množstvo oxidu uhličitého, ktorý nepriaznivo ovplyvňuje životné prostredie. Ďalším problémom fosílnych palív je postupné vyčerpávanie a súčasná geopolitická situácia. Z týchto dôvodov je dôležité hľadať vhodné alternatívy. Jedným z perspektívnych riešení je koncept vodíkovej ekonomiky, ktorý je založený na vodíku ako nosiči energie. Vodíková ekonomika vyžaduje trvalo udržateľné zdroje energie a efektívne technológie. Jednou z možných technológií na výrobu vodíka je alkalická elektrolýzy vody. Negatívom alkalickej elektrolýzy vody je nízka účinnosť, ktorá sa dá zvýšiť vhodným katalyzátorom [1-3].

Cieľom práce bola príprava viaczložkového katalyzátora Ni-Fe-W vhodného pre zero-gap elektrolyzér pre alkalickú elektrolýzu vody. Povlaky Ni-Fe-W sa vylučovali pomocou galvanického pokovovania na niklovú penu. Analyzoval sa vplyv parametrov pokovovania ako je prúdová hustota, čas pokovovania, zloženie elektrolytu, typ anódy na vlastnosti katalyzátorov. Katalyzátory sa charakterizovali pomocou SEM, EDX a XRD analýzy. Katalytické účinky sa stanovovali pomocou elektrochemických meraní. Efektivita a stabilita povlakov sa testovala v zero-gap elektrolyzéri s iónovo-selektívnou

membránou pre alkalickú elektrolýzu vody. Zistilo sa, že optimalizáciou parametrov pokovania možno pripraviť katalyzátor vhodný pre zero-gap alkalickú elektrolýzu vody.

Táto práca vznikla s podporou projektu VEGA 1/0747/21

[1] Akhtar M.S.: *J. Clean. Prod* 395, 136438 (2023).
[2] Abe J.O.: *Int. J. Hydrog. Energy*. 44, 15072 (2019).
[3] Li W.: *Mater. Adv.* 3, 5598 (2022).

7P05
BIFUNČKNÍ KATALYZÁTORY NA BÁZI SELENIDŮ PŘECHODNÝCH KOVŮ PRO POUŽITÍ V REVERZIBILNÍCH ALKALICKÝCH PALIVOVÝCH ČLÁNCÍCH

Dita Hronová[1], Jaromír Hnát[1], Karel Bouzek[1]

[1]*Ústav anorganické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 160 00, Praha 6. hronovad@vscht.cz*

Reverzibilní alkalický palivový článek představuje jednu z perspektivních technologií pro konverzi energie. Umožňuje provoz ve dvou režimech – elektrolyzéru vody pro uložení elektrické energie a palivového článku pro její výrobu. Výhodami reverzibilních zařízení jsou zejména nižší cena a nižší nároky na prostor oproti samostatným zařízením. S provozem reverzibilního článku se pojí nutnost použití bifunkčních katalyzátorů. Bifunkční katalyzátory musí být aktivní pro dvě různé elektrochemické reakce a zároveň stabilní jak v oxidačním, tak redukčním prostředí.

Selenidy přechodných kovů patří mezi perspektivní katalyzátory pro redukci kyslíku (ORR) v alkalických palivových článcích. Literatura uvádí, že tyto katalyzátory jsou vhodné také pro reakci vývoje kyslíku (OER). Selenidy však obecně vykazují malou elektrickou vodivost. Tento nedostatek může být kompenzován např. použitím vhodného nosiče katalyzátoru či změnou krystalové struktury. Cílem práce je ověřit bifunkční charakter Ni-Co-Se katalyzátoru pro použití v reversibilním alkalickém článku. Dále pak navýšit elektrickou vodivost a následně ověřit stabilitu optimalizovaného katalyzátoru. Morfologie a fyzikální vlastnosti katalyzátorů byly studovány pomocí SEM, EDS a BET analýzy. Elektrochemické vlastnosti byly měřeny pomocí elektrochemické impedanční spektro–skopie a lineární voltametrie na rotační diskové elektrodě v 0,1 mol·dm^{-3} KOH při 30 °C. Z výsledků vyplývá, že Co-Ni-Se katalyzátory vykazují aktivitu jak pro ORR, tak i pro OER.

Tento výstup vznikl v rámci projektu Specifického vysokoškolského výzkumu – projekt A2_FCHT_2023_045 a A1_FCHT_2023_004. This project has received funding from the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under grant agreement No 862509.

7P06
STUDIUM DYNAMIKY ZMĚN EXPANZNÍCH SIL A ROZMĚRŮ PILOTNÍHO ELEKTRODIALÝZNÍHO SVAZKU

Roman Kodým[1], David Tichý[2], Michal Němeček[1], Dalimil Šnita[2], Karel Bouzek[1]

[1]*Ústav anorganické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6 – Dejvice, kodymr@vscht.cz.*
[2]*Ústav chemického inženýrství, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6 – Dejvice*

Elektrodialýza (ED) představuje vyspělou a zavedenou technologii odsolování a membránové separace. Aktuálně vývoj této technologie směřuje k větším rozměrům zařízení a vyšší provozní teplotě, motivovaný zvyšováním výkonu a účinnosti procesu, snižováním provozních nákladů a využíváním nových aplikačních oblastí. Přechod z laboratorního nebo pilotního systému na průmyslový však není přímočarý. Měřítko jednoduše založené na zvětšení aktivní plochy membrány nebo počtu membrán bez příslušných úprav konstrukce jednotky často vede ke zvýraznění negativních efektů jako jsou např. rozměrové změny ED svazku v důsledku bobtnání membrán, změn mechanických vlastností materiálů atd. jako reakce na změny provozních podmínek (teplota, elektrický proud, koncentrace solí atd.). Při použití tuhého rámu pro konstrukci ED svazku může expanze svazku vést k nárůstu expanzních sil a nevratnému mechanickému poškození materiálů (membrány, distanční vložky atd.). Naopak smršťování svazku může negativně ovlivňovat jeho těsnost, a tedy spolehlivost a životnost zařízení. V předloženém příspěvku budou prezentovány kritické aspekty provozu ED v praxi a výsledky základního/aplikovaného výzkumu rozměrových a silových změn v pilotním ED svazku (100 párů heterogenních iontově-selektivních membrán, pracovní plocha 0,4 × 0,1 m^2). Získané výsledky představují solidní základ pro vývoj experimentální metodiky studia rozměrových a silových změn u podobných systémů v pilotním měřítku a návrhu autonomního systém řízení kompresní síly svazku.

Tento výzkum byl financován z projektu Ministerstva Průmyslu a Obchodu ČR, v rámci projektu TRIO (projekt TOM2022, č. FV40053).

7P07
NOVÉ SLITINOVÉ KATYLYZÁTORY PRO POUŽITÍ VE VYSOKOTEPLOTNÍCH PALIVOVÝCH ČLÁNCÍCH S PROTONOVĚ VODIVOU MEMBRÁNOU

Jan Dismas Buriánek[1], Martin Prokop[1], Tomas Bystron[1], Matija Gatalo[2], Luka Pavko[2], Nejc Hodnik[2], Karel Bouzek[1]

[1]*Ústav anorganické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika, burianej@vscht.cz*
[2]*Department of Materials Chemistry, National Institute of Chemistry, 1001 Ljubljana, Slovenia*

V současném energetickém vývoji je věnována zvýšená pozornost možnosti využití vodíku pro akumulaci energie při kolísavé produkci elektřiny obnovitelnými zdroji. Vyrobený vodík lze snadno skladovat, transportovat a využít v průmyslu či pro výrobu elektrické energie za pomocí palivových článků. V současnosti jsou nejvíce prakticky aplikovány palivové články s protonově vodivou membránou (PEMFC). Ovšem elektrochemické reakce (oxidace H_2 a redukce O_2) na elektrodách PEMFC vyžadují katalýzu, obvykle pomocí platinových kovů na uhlíkovém nosiči. Redukce obsahu platinových kovů je proto jednou z nezbytných podmínek pro snížení ceny a širší rozšíření této technologie.

Cílem této práce je posoudit potenciál nových slitinových katalyzátorů (Pt-Co na uhlíkovém nosiči) pro praktické použití ve vysokoteplotním PEMFC (HT-PEMFC), což je typ PEMFC využívající jako protonově vodivé prostředí polymerní membránu dopovanou H_3PO_4 a pracující při teplotách 160-200 °C. Pro posouzení stability Pt-Co/C katalyzátorů za podmínek relevantních pro provoz HT-PEMFC byly pomocí XRD, XRF a ICP-OES pozorovány změny ve struktuře a složení katalyzátorů během loužení v koncentrované H_3PO_4 při 180 °C. Pro stanovení klíčových kinetických parametrů reakce redukce O_2 bylo využito cyklické a lineární voltametrie za použití rotační elektrody jednak ve vodném roztoku $HClO_4$ při pokojové teplotě, jednak v koncentrované H_3PO_4 při 180 °C (prostředí simulující reálněji provozní podmínky HT-PEMFC).

Tento výstup vznikl v rámci projektu Specifického vysokoškolského výzkumu – projekt č. A2_FCHT_2023_039 Vysoké školy chemicko-technologické v Praze a byl podpořen Grantovou agenturou České republiky No. 22-23668K.

7P08
KORÓZIA KOVOV V KONTAKTE S MATERIÁLMI POUŽÍVANÝMI PRE SKLADOVANIE LATENTNÉHO TEPLA

Andrea Červenková[1], Vladimír Danielik[1]

[1]*Fakulta chemickej a potravinárskej technológii STU v Bratislave, Oddelenie anorganickej technológie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, andrea.cervenkova@stuba.sk*

Nedostatok fosílnych palív a ich negatívny vplyv na životné prostredie vedie v posledných rokoch k hľadaniu alternatívnych možností zásob energie. V dôsledku globálneho otepľovania sa do popredia dostáva solárna energia. Viaceré výskumné skupiny sa zaoberajú vývojom technológií a zariadení na efektívne ukladanie tepelnej energie vo forme latentného tepla. V priebehu posledných desaťročí boli rozsiahlo študované látky schopné ukladať teplo počas skupenskej premeny. Nazývajú sa materiály podliehajúce skupenskej premene (PCM). Schopnosť PCM akumulovať teplo je výrazne vyššia ako u látok využívajúcich citeľné teplo. Navyše prijímajú alebo odovzdávajú teplo pri takmer konštantnej teplote. Na druhej strane ich nevýhodou je možná agresívna reakcia s konštrukčnými materiálmi zásobníkov tepla sprevádzaná vznikom korózie.

Najdôležitejšou skupinou PCM sa kvôli ich vysokému latentnému teplu topenia a dobrej tepelnej vodivosti stali hydráty anorganických solí. Pre aplikáciu týchto materiálov v systémoch akumulácie latentného tepla je potrebné však poznať ich korózny účinok na používané materiály [1, 2]. Študovaný bol korózny účinok vybraných hydrátov anorganických solí na rôzne kovové materiály (nehrdzavejúca oceľ, oceľ, hliník) dlhodobými ponorovými koróznymi skúškami meraním hmotnostných úbytkov. Korózne vlastnosti boli tiež posudzované pomocou elektrochemických meraní (LPR, CV).

Táto práca vznikla vďaka podpore Ministerstva Školstva, Vedy, Výskumu a Športu SR v rámci projektu VEGA 1/0436/23 a Agentúre pre podporu výskumu a vývoja APVV-17-0183 a vďaka podpore v rámci Operačného programu Integrovaná infraštruktúra pre veľký projekt Zlepšenie univerzitných kapacít a kompetencií vo výskume, vývoji a inováciách - ACCORD, kód ITMS: 313021X329, spolufinancovaný zo zdrojov Európskeho fondu regionálneho rozvoja. Autori ďalej ďakujú STU za finančnú podporu v rámci Grantovej schémy na podporu mladých výskumníkov.

[1] Sharma A. et al.: *Renew. Sustain. Energy Rev.* 13, 318-345 (2009).
[2] Danielik V. et al.: *Mater. Corros.* 68, 416-422 (2017).

7P09
ELEKTROCHEMICKÉ METÓDY NA CHARAKTERIZÁCIU MODIFIKOVANÝCH TANÁTOVÝCH VRSTIEV ŽELEZNÝCH ARTEFAKTOV

Roman Košťúr[1], Matilda Zemanová[1]

[1]STU v Bratislave Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava; roman.kostur@stuba.sk

Pri nálezoch železných artefaktov s kultúrno-historickou hodnotou je cieľom zachovanie predmetu v takom stave, aby bol ukážkou svojej doby aj pre ďalšie generácie. Problémom pri takýchto nálezoch sú vytvorené korózne produkty na povrchu a prebiehajúca korózia. Zachovanie/ochrana predmetu prebieha postupmi, ktoré obmedzujú ďalšiu koróziu železa a nechávajú predmet stabilizovaný. Jedným z tradičných postupov, ktoré sa pri železných predmetoch používa na ochranu voči korózii, je proces využívajúci prostriedky na báze kyseliny tanínovej – tanátovanie [1]. Tanátovanie funguje na princípe modifikácie koróznych produktov železa tak, že sa na povrchu skorodovaného artefaktu vytvára ochranný konverzný povlak čierneho tanátu železitého. Cieľom práce je snaha o modifikáciu povlaku na zvýšenie koróznej odolnosti pomocou aniónových ílov s vrstevnatou štruktúrou - hydrotalkitov. Hydrotalkity predstavujú vhodný materiál pri ochrane voči korózii vďaka svojej schopnosti vymieňať ióny [2].

Charakterizovali a porovnávali sa modifikované tanátové vrstvy s rôznym prídavkom hydro–talkitov použitím elektrochemických metód. Na charakterizáciu sa používali impedančná spektroskopia (EIS) a potenciodynamická polarizácia (LSV). Metódami EIS a LSV sa zistilo, že s prídavkom hydrotalkitov sa zlepšujú ochranné vlastnosti pripraveného modifikovaného povlaku.

Táto práca vznikla vďaka podpore Ministerstva Školstva, Vedy , Výskumu a Športu SR v rámci projektu VEGA 1/0747/21. Autori ďalej ďakujú STU za finančnú podporu v rámci Grantovej schémy na podporu mladých výskumníkov.

[1] Hollner S. et al: *Corros. Eng. Sci. Technol.* 45: 362-366 (2010).
[2] Nishimura S. et al: *Green Chem. 15:* 2026-2042 (2013).

7P10
SLEDOVANIE STABILITY ŽELEZANOV

Michaela Benköová, Emília Mališová, Ján Híveš

Fakulta chemickej a potravinárskej technológii STU v Bratislave, Oddelenie anorganickej technológie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, michaela.benkoova@stuba.sk

Železany sú zlúčeniny železa s oxidačným číslom +VI. Sú silnými oxidačnými, ale aj výbornými dezinfekčnými a koagulačnými činidlami. Vďaka týmto vlastnostiam sa využívajú v rôznych oblastiach (organické syntézy, korózne inžinierstvo). Železany sú však najviac využívané v oblasti čistenia a dočisťovania odpadových a povrchových vôd. Nevýhodou je ich samotný vysoký redoxný potenciál komplikujúci ich výrobu a taktiež vysoká reaktivita pripravených produktov. To spôsobuje ich relatívne nízku stabilitu. V súčasnosti je predmetom skúmania možnosti zvyšovania stability železanov [1, 2].

Cieľom práce bolo zlepšenie stability železanov pomocou tabletovania so zeolitmi a tiež kombináciou zeolit-železan v kapsule. Pripravené tablety mali rôzny pomer železanu a zeolitu a kapsule boli tlačené na 3D tlačiarni. K dispozícii bolo 5 obalových materiálov, ktoré boli bio-degradovateľné a vo vode rozpustné materiály. Ako bio-degradovateľné materiály boli použité kyselina polymliečna (PLA) bielej a čiernej farby. Z voderozpustných materiálov to boli BVOH (buténdiol vinylalkoholový kopolymér), PVA (polyvinylalkohol) a PVA+ (polyvinylalkohol+). Tento materiál je na rozdiel od PVA ľahšie stlačiteľný.

Z výsledkov získaných z ročného sledovania stability je jasné, že stabilita nezakapsulovaných vzoriek klesala rýchlejšie ako stabilita tabletovaných vzoriek so zeolitom alebo pri kombinácii zeolit-kapsula.

Táto práca vznikla vďaka podpore Ministerstva Školstva, Vedy, Výskumu a Športu SR v rámci projektu VEGA 1/0436/23 a Agentúrou pre podporu výskumu a vývoja APVV-17-0183. Autori ďalej ďakujú za finančný príspevok z Grantovej schémy STU na podporu mladých výskumníkov.

[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).

7P11
RIEŠENIE PROBLÉMU ENVIRO-ZÁŤAŽE V STRÁŽSKOM

Ján Híveš[1], Ladislav Štibrányi[1], Jaroslava Maroszová[2], Michaela Benkoöová[1]

[1]*OAT ÚACHTM FCHPT, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, jan.hives@stuba.sk*
[2]*OACh ÚACHTM FCHPT, Radlinského 9, 812 37 Bratislava*

Chemická továreň Chemko Strážske bola založená v povojnovej Československej republike ako chemický kombinát Strážske-národný podnik v roku 1952. Najdôležitejšou úlohou novozaloženého podniku bola od začiatku výroba výbušnín pre armádu a tiež medziproduktov pre civilný sektor. Polychlórované bifenyly (PCB) sú substitučné izoméry bifenylu, kde substituentom je Cl v rôznych polohách a v rôznom počte. Ide o súbor tzv. kongenérov, ktorých empirický vzorec možno všeobecne zapísať ako $(C_{12}H_{10})_nCl_n$, kde n môže nadobúdať hodnoty od 1 po 10. Vlastnosti PCB - vysoká tepelná kapacita, vysoká teplota vzplanutia, dielektrický charakter látky sú vlastnosti, ktoré zapríčiňovali ich masívne využívanie v uzavretých systémoch – v transformátoroch, kondenzátoroch a podobne, no taktiež sa ich vlastnosti využívali v tzv. otvorených systémoch ako aditíva do plastov, chladiče a podobne. Ich technologický význam spočíva aj v ich nepolárnom charaktere zabezpečujúcim schopnosť PCB rozpúšťať sa, ale aj pôsobiť ako veľmi dobré organické rozpúšťadlo.

Po skromných začiatkoch v roku 1959 sa výroba chlórovaných bifenylov postupne zvyšovala. Vyrábali sa PCB typu Delor 103 resp. Aloclor 1242 (40 % Cl), ktorý sa využíval ako náplň do kondenzátorov a transformátorov, Delor 106 resp. Aloclor 1260 (60 % Cl), využívaný ako prísada do tlačiarenských farieb, Delotherm –kvapaliny do teplo-výmenných systémov a Hydelor – kvapaliny do hydraulických a mazacích systémov. V roku 1966 dosiahla výroba 100 ton ročne a zlom nastal v roku 1973 keď výroba narástla z cca 600 na 1600 až 2000 ton ročne. Obdobie maximálnej produkcie trvalo až do roku 1984, keď sa výroba z ekologických a environmentálnych dôvodov definitívne zastavila. Celkove sa v Chemku vyrobilo 21 428 t výrobkov na báze chlórovaných bifenylov, z ktorých sa 9 869 t (46 %) exportovalo (najmä do bývalej NDR). Zvyšok, t.j. 11 613 t odobrali českí a slovenskí odberatelia.

Závažným problémom PCB je ich mimoriadna odolnosť voči degradačným vplyvom ide o veľmi stabilné látky čo PCB zaraďuje k tzv. POP látkam (perzistentné organické polutanty). Sú všeobecne známe vysokou teplotou varu čo súvisí to s ich vysokou molekulovou hmotnosťou. Ďalším znakom je ich nízka rozpustnosť vo vode, ktorá klesá s rastúcim počtom chlórov. Sú teda hydrofóbne a preto aj rozpustné v organických látkach, napr. lipidoch, čo má za následok fakt, že pretrvávajú v organizmoch živočíchov práve v tejto rozpustenej podobe (bioakumulácia). Nebezpečná je ich vysoká toxicita – PCB spadajú do skupiny potenciálnych mutagénov, karcinogénov, endokrinných disruptorov (narúšajú produkciu hormónov v tele, v prípade PCB ide konkrétne o produkciu estrogénu). Ich účinok na organizmus je taktiež aj hepatotoxický a neurotoxický. V dôsledku ich perzistencie a bioakumulácie sa ľahko prenášajú v rámci potravinového reťazca (napr. PCB z kontaminovanej vody sa dostane do organizmu ryby, tú skonzumuje dravec a toho zas skonzumuje človek). Kontaminácia PCB je celosvetový problém v oblastiach bývalej (aj súčasnej) výroby týchto látok.

V tejto práci sumarizujeme výsledky likvidácie znečistenia PCB látkami v Strážskom ako aj možnosti dočisťovania kontaminovaných po–vrchových vôd pomocou železanov a zeolitov, prípadne ich kombináciou.

Táto práca vznikla vďaka podpore Ministerstva Školstva, Vedy, Výskumu a Športu SR v rámci projektu VEGA 1/0436/23 a spolupráce s MV SR v rámci projektu „PCB Strážske“.

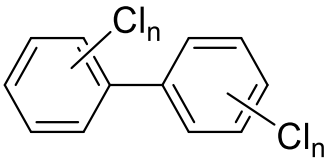
7P12
POLYCHLÓROVANÉ BIFENYLY STRÁŽSKE - MINULOSŤ A SÚČASNOSŤ

Ladislav Štibrányi[1], Viktor Milata[1], Ján Híveš[2]

[1]*Ústav organickej chémie, katalýzy a petrochémie, FCHPT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, ladislav.stibranyi@stuba.sk*
[2]*Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov, FCHPT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava*

Polychlórované bifenyly (PCB) sú substitučné izoméry bifenylu kde substituentom je Cl v rôznych polohách v rôznom počte: ide o súbor tzv. kongenerov ktorých celkovo existuje 209. PCB vznikajú substitučnou reakciou bifenylu z chlórom za katalýzy $FeCl_3$. Každému kongeneru je priradené označovacie číslo od 1 po 209 v závislosti od polohy a počtu chlórových substituentov. Ich konkrétne označovanie je dôležité, nakoľko ich chemické fyzikálne vlastnosti a toxikologické účinky sa navzájom

výrazne líšia. Vlastnosti PCB - vysoká tepelná kapacita, oxidačná stabilita a dielektrický charakter zapríčinili ich masívne využívanie v uzavretých teplovýmených systémoch, trans–formátoroch a kondenzátoroch. Boli používané aj ako zložka oxidačne stabilných náterových hmôt. Celkove sa na svete vyrobilo cca 1,5 milióna ton polychlórovaných bifenylov. Práve ich mimoriadna stabilita a odolnosť voči degradačným procesom zaraduje ich k tzv. POP latkám (perzistentným organickým látkam) akumulujúcim sa v lipidoch. PCB spadajú do skupiny potenciálnych mutagénov a estrogénoch disruptorov a látok z neurologickými účinkami.



Cl: n = 1-5

V podniku Chemko Strážske n.p. sa v roku 1959 začala výroba bifenylu a následne sa tento spracovával na prakticky dva hlavné základné výrobky: Delor 103 (Alochlor 1242) - s obsahom chlóru 40%, ktorého sa vyrobilo 14.500 ton a Delor 106 (Alochlor 1260), ktorého sa vyrobilo 4.500 ton. Celková produkcia PCB dosiahla za roky 1959 až 1980, kedy sa pod tlakom novej environmentálnej legislatívy zastavila, bola na úrovni 21.500 ton. V prednáške budú diskutované nepriaznivé vplyvy výroby na prírodu, vodu a kontamináciu pôdy. Autori umožnia nahliadnuť do náročného procesu likvidácie následkov, ktoré zanechala výroba v podobe environmentálnych záťaži viac ako 1.000 ton. Príklad spolupráce v Strážskom je dôkazom, že aplikované poznanie prezentované akademickou obcou prináša po viac ako 30 rokoch v spolupráci zo štátom a samosprávou úspech. Na prácach sa okrem FCHPT podieľala Záchranná brigáda hasičského a záchranného zboru MV v Humennom, pracovníci kontrolného chemického laboratória MV v Jasove, pracovníci Geologického ústavu Dionýza Štúra v Košiciach a pracovníci Vodohospodárskeho podniku v Michalovciach.

Tento príspevok vznikol na základe Uznesenia vlády SR o vyhlásení mimoriadnej situácie a následne uznesenia vlády č.752 /2020 2.decembra 2020, kde boli vyčlenené prostriedky v objeme 500 000 euro. Vláda SR zaviazala uznesením ministra vnútra a ministra životného prostredia vykonanie záchranných prác: STU sa od začiatku aktívne podieľala na práci v riadiacej skupine MV. Spolupráca bola legalizovaná podpísaním zmluvy o partnerstve medzi MV a FCHPT STU, ktorá umožňuje čerpať 100 000 euro na technickú, odbornú a koordinačnú činnosť v projekte a vývoj technológie na odstraňovanie PCB z vody.

[1] Ján Kovač ,Daniel Kovač: Účinky dioxinov a PCB na ľudský organizmus, ich vplyv na vývoj zubov pri deťoch dojčených materským mliekom. Hygiena 2011 (4) 116-126. LF UK a OÚSA, Bratislava.

[2] Robert Chriaštel, Katarína Magulová, Martin Murín, Juraj Gavora: Monitoring perzistentých organických látok v Slovenskej republike (technická správa č. 2, časť 1), (účelová publikácia, ISBN 80-88907-36-5), apríl 2003, 202 strán.

[3] Robert Chriaštel, Katarína Magulová, Martin Murín, Juraj Gavora: Monitoring perzistentých organických látok v Slovenskej republike (technická správa č. 2, časť 2), (účelová publikácia, ISBN 80-88907-36-5), apríl 2003, 112 strán.

CENA MARTY SALIŠOVEJ

CMS01
DEVELOPMENT OF AN ANALYTICAL METHOD FOR MONITORING SELECTED BIOPLASTICIZERS IN WATER

Nicolette Viktoryová[1], Agneša Szarka[1], Francisco Javier Arrebola Liébanas[2]

[1]*Slovak Technical University in Bratislava, Faculty of Chemical and Food Technology, Institute of Analytical Chemistry, Radlinského 9, 812 37, Bratislava, nicolette.viktoryova@stuba.sk*
[2]*University of Almería, Department of Chemistry and Physics, ceiA3, E-04120 Almería, Spain*

Bioplasticizers are an alternative to petroleum-based plasticizers, that have a strong impact on environment, because they offer advantages such as recyclability and low volatility [1]. Although bioplasticizers have been researched for several years, their implementation and ecological impact still require attention and close monitoring, as bioplasticizers leak into the environment during the degradation of bioplastics. This could lead to environmental contamination, thus monitoring of bioplasticizers in the environment is essential at very low concentrations [2].

The aim of this work was to develop a new analytical method for extraction and determination of twenty-one bioplasticizers from water samples using DI-SPME-GC-MS/MS to monitor these substances. During the development of the SPME extraction procedure, the following parameters were optimized: incubation time, incubation temperature, extraction time, desorption time and temperature. All solutions of selected analytes were first incubated in a heating chamber for 10 minutes at 70°C, followed by SPME extraction using 50/30µm DVB/CAR/PDMS fiber (Stableflex). The extraction was followed by thermal desorption of the analytes at 250-270 °C for 3 minutes in the inlet. Plasticizers were detected by GC-MS/MS analysis and optimal parameters for SPME were selected. Positive results were found in real agricultural water samples.

This work was supported by the STU Young Researchers Support Program. This work was supported by the Research and Development Support Agency based on Contract no. APVV-19-0149 and the Scientific Grant Agency of the Ministry of Education and Science of the Slovak Republic and the Slovak Academy of Sciences on the basis of the VEGA 01/0412/20 project.

[1] Hassan A. A., Abbas A., Rasheed T., Bilal M., Iqbal H.M.N., Wang S.: *Science of the Total Environment.* 682 (2019).
[2] Zappaterra F., Renzi M., Piccardo M., Spennato M., Asaro F., Di Serio M., Vitiello R., Turco R., Todea A., Gardossi L.: *Polymers.* 15, 1536 (2023).

CMS02
KATALYTICKÁ HYDROGENACE CO_2 NA KATALYZÁTORECH TYPU OXIDŮ KOBALTU

Zuzana Kovářová[1], Libor Kvítek[1]

[1]*Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, 17. listopadu 1192/12, 771 46 Olomouc, Univerzita Palackého v Olomouci, Česká republika, sarrahguie@centrum.cz*

Skleníkový efekt je v dnešní době jedním z nejdiskutovanějších témat týkajících se globálního oteplování. Hlavní složkou skleníkových plynů je oxid uhličitý, jehož koncentrace v atmosféře rapidně stoupá. Katalytická hydrogenace CO_2 využívající katalyzátory na bázi oxidů kobaltu může být vhodnou cestou pro přeměnu oxidu uhličitého na v praxi využitelnější produkty, jako jsou metan, metanol a vyšší uhlovodíky [1].

Katalyzátory na bázi oxidů kobaltu, především Co_3O_4, mají velmi dobrý potenciál být efektivními katalyzátory pro konverzi CO_2 disponující kovovým kobaltem jako aktivními místy katalyzátoru [2].

V rámci tohoto výzkumu byly připraveny čtyři rozdílné vzorky ze dvou různých prekurzorů, které se lišily teplotou termické dekompozice. Po termické dekompozici byly všechny vzorky plně transformovány na Co_3O_4 a byla na nich testována katalytická aktivita. Velikost částic a pórů připravených katalyzátorů se pohybovala v nanometrové oblasti.

Katalytická aktivita byla měřena v reaktoru Microactivity Effi v teplotním rozsahu 200-500 °C. Byla testována katalytická aktivita, jak při vysokém tlaku 20 bar, tak i při atmosférickém tlaku. Produkty byly analyzovány pomocí spojení metod GC/MS a následně byly vyhodnoceny hodnoty konverze CO_2, selektivity jednotlivých produktů a výtěžek reakce STY (Space-time-yield). Nejvyšší hodnoty konverze se pohybovaly okolo 50 % a selektivita pro metan u vzorků

připravených z prekurzoru šťavelanu kobaltnatého až okolo 90 %.

Za finanční podporu děkuji internímu grantu Přírodovědecké fakulty Univerzity Palackého v Olomouci číslo IGA_PrF_2022_026.

[1] Jia, J.; Qian, C.; Dong, Y.; Li, Y. F.; Wang, H.; Ghoussoub, M.; Butler, K. T.; Walsh, A.; Ozin, G. A. Heterogeneous Catalytic Hydrogenation of CO_2 by Metal Oxides: Defect Engineering-Perfecting Imperfection. *Chemical Society Reviews* (2017).
[2] Wang, M.; Zhang, G.; Zhu, J.; Li, W.; Wang, J.; Bian, K.; Liu, Y.; Ding, F.; Song, C.; Guo, X. Unraveling the Tunable Selectivity on Cobalt Oxide and Metallic Cobalt Sites for CO_2 Hydrogenation. *Chemical Engineering Journal* (2022).

CMS03
ANALÝZA MASTNÝCH KYSELÍN S KRÁTKYM A STREDNE DLHÝM UHLÍKOVÝM REŤAZCOM V SYROCH POMOCOU GC-MS

Michal Fulín[1], Richard Gruchaľák[1], Jaroslav Blaško[1], Ľubomíra Duhačková[1], Janka Kubincová[2], Marek Kunštek[3]

[1]*Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra analytickej chémie, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovenská republika, fulin1@uniba.sk*
[2]*Národné poľnohospodárske a potravinárske centrum, Výskumný ústav potravinársky, Priemyselná 4, 824 75 Bratislava, Slovenská republika*
[3]*Národné poľnohospodárske a potravinárske centrum, Výskumný ústav potravinársky, Kostolná 1540/7, 900 01 Modra*

Dôležitými a dokonca prevládajúcimi zložkami arómy a chuti mnohých druhov syrov sú mastné kyseliny. Počas zrenia syra môžu voľné mastné kyseliny, obsahujúce štyri alebo viac atómov uhlíka, pochádzať z lipolýzy mliečneho tuku alebo chemického rozkladu aminokyselín. Mastné kyseliny s dlhým reťazcom (>12 atómov uhlíka) vo všeobecnosti zohrávajú v chuti a charakteristickej aróme menšiu úlohu, vzhľadom na znižujúcu sa prchavosť. Mastné kyseliny s krátkym a stredne dlhým reťazcom a párnym číslom (C4 – C12) majú oveľa nižšie prahy vnímania a každá z nich má charakteristickú vôňu [1].

Na základe dostupných vedeckých štúdii sa na analýzu týchto látok používajú metódy HPLC alebo CE, avšak ako najúčinnejšia sa javí metóda GC-FID [2]. V rámci predloženej práce sme testovali novú techniku izolácie, derivatizácie a separácie voľných mastných kyselín s využitím metódy in-situ silylácie, za účelom odstrániť krok extrakcie, ktorý je bežný v doteraz používaných metódach analýzy.

V rámci predloženej práce sme testovali novú techniku izolácie, derivatizácie a separácie voľných mastných kyselín s využitím metódy in-situ silylácie, za účelom odstrániť krok extrakcie, ktorý je bežný v doteraz používaných metódach analýzy.

Táto štúdia bola podporená z Operačného programu integrovanej infraštruktúry pre projekt Zvyšovanie kapacít a kompetencií univerzity vo výskume, vývoji a inováciách, ITMS2014+: 313021X329 a ITMS2014+: 313011AVA9 spolufinancovaný z Európskeho fondu regionálneho rozvoja. Práce podporila aj Agentúra na podporu výskumu a vývoja pod číslami zmlúv APVV-18-0282, APVV-20-0317, APVV-15-0466 a APVV-21-0323.

[1] Curioni P. M. G., Bosset J. O. *International Dairy Journal.* 12, 12 (2002).
[2] Pileire B., Beaune P., Laudat M. H.: *J. Chromatogr.* 182, 3-4 (1980).

CMS04
POMALÁ MAGNETICKÁ RELAXÁCIA V JEDNOJADROVÝCH MN(II) KOMPLEXOCH

Romana Mičová[1], Cyril Rajnák[1], Ján Titiš[1], Erika Samoľová[2,3], Michal Zalibera[4], Alina Bieńko[5], Roman Boča[1]

[1]*Univerzita sv. Cyrila a Metoda v Trnave, Fakulta prírodných vied, Nám. J. Herdu 2, Trnava 917 01, micova1@ucm.sk*
[2]*X-Ray Crystallography Facility, UC San Diego, 5128 Urey Hall MC 0358, 9500 Gilman Drive, La Jolla CA, USA*
[3]*Fyzikální ústav Akademie věd ČR, Na Slovance 2, 182 21 Praha 8, Česká republika*
[4]*Oddelenie fyzikálnej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 2101/9, Bratislava, 812 38*
[5]*Faculty of Chemistry, University of Wrocław, F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław, Poland*

Najnovšie pamäťové média síce predstavujú enormný pokrok, predovšetkým zdokonalením technologických postupov, ale predstava využitia jedinej molekuly, ako nositeľa 1 bitu na súčasne veľké média je revolučná. Podtrieda jednoiónových magnetov (SIMs) sa neustále zväčšuje a do dnešných dní zahŕňa napr. vysokospinové jednojadrové Mn(II), Fe(III), Fe(II), Fe(I), Co(II) a tiež Ni(II) komplexy [1]. Jednojadrové komplexy kobaltu (II) sú známe ako systémy so značnou magnetickou anizotropiou,

ktorá sa prejavuje miernym (tetraédrické štruktúry) alebo veľkým (oktaédrické štruktúry) štiepením v nulovom poli (z angl. „*zero field splliting*“). Jedným z najdôležitejších parametrov štiepenia v nulovom poli je axiálny parameter *D*. Ten môže do veľkej miery ovplyvniť celkovú magnetickú relaxáciu molekulových magnetov, nakoľko určuje veľkosť bariéry spinového otočenia. Jednojadrové Mn(II) komplexy ako SIMs sú zatiaľ veľmi ojedinelé [2, 3]. Je to hlavne z dôvodu miernej magnetickej anizotropie čo znamená, že *D* parameter v takýchto komplexoch je zväčša veľmi malý. V tomto prípade EPR spektrá v X-pásme nie sú tiché a umožňujú stanovenie spin-Hamiltonovských parametrov s oveľa vyššou presnosťou ako DC magnetometria.

V práci uvádzame dva hexakoordinované Mn(II) komplexy so všeobecným vzorcom $[Mn(hfa)_2(4\text{-bzpy})_2]$ **1** a $[Mn(hfa)_2(4\text{-bzpyCl})_2]$ **2** tvorené chelatujúcim ligandom hexafluoroacetyl–acetonátom (hfa) a derivátmi pyridínu (4-bzpy = 4-benzylpyridín; 4-bzpyCl = 4-chloro-(4-benzylpyridín)). Oba vykazujú DC magnetické správanie typické pre vysoký spin $S = 5/2$: $g \sim 2$, D – malá hodnota. AC susceptibilita potvrdzuje poľom indukovanú pomalú magnetickú relaxáciu, kde Orbachov relaxačný proces ponad bariéru nehrá rolu. Oba systémy vykazujú dva alebo tri relaxačné kanály.

Poďakovanie patrí slovenským grantovým agentúram (APVV 19-0087, APVV 18-0016, VEGA 1/0191/22, VEGA 1/0078/21, VEGA 1/0086/21) za finančnú podporu.

[1] Craig, G. A, Murrie, M.: *Chem. Soc. Rev. 44,* 2135-2147 (2015).
[2] Rajnák, C., Titiš, J., Moncoľ, J., Mičová R., Boča, R.: *Inorg. Chem. 58,* 991-994 (2019).
[3] Mičová, R., Rajnák, C., Titiš, J., Samoľová, E., Zalibera, M., Bieńko, A., Boča, R.: *Chem. Commun. 59,* 2612 (2023).

CMS05
ŠTÚDIUM MIKROŠTRUKTÚRY VZORIEK NA BÁZE DIMETAKRYLÁTU A VPLYV VARIABILNÝCH PARAMETROV NA ICH VLASTNOSTI

Katarína Cifraničová[1], Ondrej Šauša[1,2], Dávid Pavel Královič[1], Helena Švajdlenková[1,3]

[1]*Katedra jadrovej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovenská republika, katarina.cifranicova@uniba.sk*
[2]*Fyzikálny inštitút, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 11 Bratislava, Slovenská republika*
[3]*Inšitút polymérov, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 11 Bratislava, Slovenská republika*

Mikroštruktúralne vlastnosti boli študované na komerčnej fotopolymérnej zmesi dvoch dimetakrylátov (2M) s prídavkom fotoiniciátora (TPO-L) pomocou pozitrónovej anihilačnej spektroskopie (PALS), blízkej infračervenej spektroskopie (NIR) a merania objemovej hustoty. Najprv sa pomocou PALS skúmali zmeny v lokálnom voľnom objeme počas zosieťovania diskontinuálne osvetlených 2M vzoriek dvoch rôznych hrúbok. K vzorkám bol pridávaný fotoiniciátor (PI) o dvoch koncentráciách (0,1 mol % alebo 0,5 mol %). Priebeh zmien voľného objemu pri fotopolymerizácii 2M vzoriek charakterizovali časové parametre. Vplyv oboch parametrov, t.j. rôznej hrúbky a koncentrácie PI na charakteristiky voľného objemu finálnych vytvrdených vzoriek poly2M, koreluje s objemovou hustotou a konverziou monomérov získanými z NIR. Mikroštrukturálna štúdia vzoriek poly2M pre rôznu hrúbku a koncentráciu fotoiniciátora (PI) však odhalila, že zvýšené množstvo PI a zníženie hrúbky vedie k výraznejším mikroštrukturálnym rozdielom. Mikroštrukturálne charakteristiky voľného objemu môžu byť jedným z dôležitých faktorov ovplyvňujúcich konečné vlastnosti materiálu.

Autori ďakujú agentúre APPV (APPV-16-0369 a APVV-21-0335) a grantom UK č. (UK/74/2022) za financovanie výskumu.

CMS06
ANALÝZA GLYKÁNOV AKO DIAGNOSTICKÝ NÁSTROJ RAKOVINOVÝCH OCHORENÍ

Andrea Pinkeová[1], Adela Tomíková[1], Anikó Bertóková[1], Tomáš Bertók[1], Ján Tkáč[1]

[1]*Glycanostics, s.r.o., Kudláková 7, Bratislava 841 01, Slovensko, andrea.pinkeova@glycanostics.com*

Rakovina prostaty (PCa) je celosvetovo druhým najrozšírenejším nádorovým ochorením postihujúcim mužov so stúpajúcou incidenciou. Súčasný štandard využívaný pri diagnostike PCa (pomocou PSA) vedie k nadmernému počtu vykonaných biopsií. S dostupnými metódami je pre urológov veľmi náročné rozhodnúť o nutnosti biopsie najmä v tzv. šedej zóne [1, 2]. Cieľom štúdie je stanovenie vhodného biomarkera pre PCa, ktorý by dokázal zlepšiť manažment pacientov, znížiť počet negatívnych biopsií a eliminovať bariéry medzi lekármi a asymptomatickými pacientami. Pre účely tejto štúdie boli analyzované vzorky ľudského séra zo štyroch rôznych európskych krajín. Všetci pacienti zahrnutí do tejto štúdie mali vek nad 40 rokov a podstúpili biopsiu na základe, ktorej boli vytvorené dve skupiny pacientov - skupina s rakovinou a skupina s benígnou hyperpláziou prostaty. Obe kohorty mali sérologické hladiny tPSA v rozmedzí 2-10 ng/mL. Vytvorila sa podskupina pre monitoring účinnosti liečby, kde sa porovnávali výsledky dosiahnuté v dvoch skupinách, a to PCa pacientov s liečbou a PCa pacientov bez akejkoľvek liečby. Glykoprofilácia sa uskutočnila analýzou zmien štruktúry glykánov (komplexných sacharidov). Použitie novej metodiky využíva magnetické častice modifi–kované peroxidázou a protilátkou ako nosiče pre špecificky naviazané a následne analyzované glykoproteíny. Tieto glykoproteíny boli následne inkubované na lektínom modifikovaných ELISA platničkách. Glyko–profilácia fPSA preukázala významný klinický potenciál nielen na skorú diagnostiku PCa (AUC = 0,84; 501 vzoriek), ale aj pri monitorovaní účinnosti terapie (AUC = 0,85; 168 vzoriek). Štúdium a pochopenie posttranslačných zmien proteínov ponúka potenciál využitia glykoproteínov pri diagnostike rôznych nádorových ochorení.

Štúdia vznikla vďaka finančnej podpore získanej od Agentúry na podporu výskumu a vývoja APVV20-0476 a je spolufinancovaná grantom EIC Accelerator 190185443 (Horizon Europe).

[1] Bertók T., et. al.: *Cancers.* 2988, 12(10), (2020).

[2] Bertók T., et. al.: *Chemosensors* 205, 9(8), (2021).

CMS07
ELEKTROCHEMICKÉ VLASTNOSTI MONOKRYSTALICKÝCH BOREM DOPOVANÝCH DIAMANTOVÝCH ELEKTROD S RŮZNÝMI KRYSTALOVÝMI ORIENTACEMI A JEJICH APLIKACE V ELEKTROANALÝZE

Peter Čambal[1], Simona Baluchová[1], Jana Poláková[1], Andrew Taylor[2], Karolina Schwarzová-Pecková[1]

[1]*Univerzita Karlova, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Albertov 2038/6, 128 00 Praha 2, Česká republika, cambalp@natur.cuni.cz*
[2]*FZU – Fyzikální ústav Akademie věd ČR v. v. i., Na Slovance 1999/2, 182 21 Praha 8, Česká republika*

Borem dopovaný diamant (BDD) je atraktivní elektrodový materiál, který se v elektrochemii používá od roku 1992 [1]. Unikátní vlastnosti zahrnující široké potenciálové okno ve vodných i nevodných prostředích, nízké proudy pozadí, velké přepětí kyslíku, chemickou stabilitu v náročných podmínkách zahrnujících vysoké teploty a proudové hustoty, biokompatibilitu a možnost generace hydroxylových radikálů *in situ* [2, 3] z BDD dělají ideální materiál pro elektroanalýzu organických látek, elektro–chemickou degradaci polutantů v odpadních vodách, elektrosyntézu, elektrokatalýzu, ale i uskladnění elektrické energie. Navíc lze BDD povrchy různě modifikovat a vylepšit tak jejich vlastnosti pro elektroanalytické aplikace. Elektrochemická odezva a další vlastnosti konvenčních polykrystalických BDD elektrod však závisí na několika důležitých faktorech, jako je: i) koncentrace boru, ii) terminace povrchu (H-*vs.* O-), iii) obsah nediamantového sp^2-uhlíku a iv) krystalová orientace [2, 4], které řídí vodivost a ovlivňují heterogenní kinetiku elektronového přenosu.

Monokrystalické (single-crystal, SC-BDD) BDD zatím nebyly dostatečně studovány ani využívány jako elektrody. Nejčastěji jsou studovány krystalové orientace {111}, {100} a {110}, které se přirozeně vyskytují v polykrystalických BDD. Různé krystalové orientace na povrchu BDD filmů ovlivňují jejich elektrochemické chování [5]. Porozumění vlivu krystalové orientace na elektrochemické chování a další vlastnosti BDD je zajímavá možnost cílené úpravy BDD povrchu pro elektroanalýzu specifických organických látek. Jedním z přístupů je studium homo–epitaxiálně

nebo heteroepitaxiálně připravených SC-BDD elektrod s konkrétní krystalovou orientací. Výzvou při studiích SC-BDD filmůje již jejich samotná příprava. Jako substrát jsou potřebné dobře definované diamantové monokrystaly o dostatečné velikosti, což se odráží na ceně. Ideálně je povrch SC-BDD hladký, bez (nebo s minimálním množstvím) sp^2 uhlíku a povrchových defektů.

V této práci byly porovnávány SC-BDD s krystalovými orientacemi {113}, {115}, {118} a {110} lišící se koncentrací boru (B/C = 250, 500, 1000 a 2000 ppm při depozici v plynné fázi). Obsah boru v jednotlivých SC-BDD byl určen pomocí Ramanovy spektrometrie a z měření Hallova jevu. Cílem této práce bylo zejména prozkoumat vliv jednotlivých krystalových rovin na elektrochemické chování, dále možnosti změny terminace povrchu (H-terminovaný na O-terminovaný a regenerace H-terminovaného povrchu katodickým pre-treatmentem) a vliv různé terminace na elektrochemické chování. Prozkoumána byla i stabilita H-terminovaného povrchu, regenerovaného pomocí katodického pre-treatmentu. Následně byla posouzena jejich vhodnost pro elektroanalýzu dopaminu. Dosažené meze detekce a kvantifikace pro dopamin byly porovnány s hodnotami dosaženými na porézních, polykrystalických a chemicko-mechanicky leštěných BDD elektrodách. V budoucnosti je na SC-BDD plánováno měření v reálných vzorcích, prozkoumání adsorpčních jevů a možností strukturace elektrodového povrchu pomocí graftingu molekul s různými funkčními skupinami vhodnými pro bioanalytické aplikace.

Tento výzkum probíhal za finanční podpory grantů GAČR (projekt 23-05688S) a Univerzity Karlovy (Specifický univerzitní výzkum, projekt (SVV 260690)).

[1] Patel K., Hashimoto K., Fujishima A.: Denki Kagaku *60*, 659 (1992).
[2] Yang N., Yu S., Macpherson J. V., Einaga Y., Zhao H. Y., Zhao G. H., Swain G. M., Jiang X.: *Chem. Soc. Rev. 48*, 157 (2019).
[3] Yu S., Liu S., Jiang X., Yang N.: *Carbon 200*, 517 (2022).
[4] Baluchová S., Daňhel A., Dejmková H., Ostatná V., Fojta M., Schwarzová-Pecková K.: *Anal. Chim. Acta 1077*, 30 (2019).
[5] Taylor A., Baluchová S., Fekete L., Klimša L., Kopeček J., Šimek D., Vondráček M., Míka L., Fischer J., Schwarzová-Pecková K., Mortet V.: *Diam. Relat. Mat. 123*, 108815 (2022).

CMS08
STUDIUM ELEKTROCHEMICKÉHO CHOVÁNÍ PRIMÁRNÍCH A SEKUNDÁRNÍCH ŽLUČOVÝCH KYSELIN A JEJICH KONJUGÁTŮ

Kristýna Jelšíková[1], Eva Bláhová[1], Jana Kubešová[1], Jana Skopalová[2], Karolina Schwarzová-Pecková[1]

[1]*Univerzita Karlova, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Albertov 6, 128 00 Praha 2, kristyna.jelsikova@natur.cuni.cz*
[2]*Univerzita Palackého, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, 17. listopadu 12, 771 46, Olomouc*

Žlučové kyseliny jsou látky, které vznikají v játrech metabolickou přeměnou cholesterolu. Takto vzniklé žlučové kyseliny se nazývají primární, v lidském těle se jedná o cholovou a chenodeoxycholovou kyselinu. Ty mohou být přímo v játrech dále konjugovány s taurinem a glycinem, dochází ke snížení hodnot jejich pK_a a zlepšení rozpustnosti ve vodě, což usnadňuje jejich vylučování z organismu do moči. Další možností je jejich transport do tlustého střeva, kde působením mikroorganismů dochází k dehydro–xylaci v pozici C7 a vznikají tzv. sekundární žlučové kyseliny (deoxycholová, ursodeoxy–cholová a litocholová kyselina) [1]. Žlučové kyseliny ve své struktuře obsahují steroidní jádro, které je elektrochemicky neaktivní. Elektro–chemická aktivita žlučových kyselin a jejich konjugátů tak závisí na počtu dvojných vazeb ve steroidním jádře a na funkčních skupinách, které jsou na jádro navázány. Novým přístupem je elektrochemická oxidace žlučových kyselin, kdy dochází nejprve k aktivaci steroidního jádra pomocí dehydratace silnou kyselinou, takto aktivovaná struktura dále podléhá elektro–chemické oxidaci [2,3].

Předmětem studia bylo elektrochemické chování vybraných primárních a sekundárních žlučových kyselin (cholová a chenodeoxycholová, deoxy–cholová. ursodeoxycholová a litocholová kyselina) a konjugátů primárních žlučových kyselin s taurinem a glycinem v prostředí acetonitrilu a kyseliny chloristé s minimálním obsahem vody (*ca* 0,55 %) na borem dopované diamantové elektrodě. Byl zkoumán rozdíl mezi odezvou primárních žlučových kyselin a jejich konjugátů v oblasti kladných potenciálů. V tomto případě byl pozorován anodický ireverzibilní signál při *ca* +1,2 V (*vs.* $Ag/AgNO_3$ v aceto–nitrilu). V oblasti záporných potenciálů při *ca* –0,4 V dochází k navýšení odezvy primárních

žlučových kyselin, oproti tomu u sekundárních žlučových kyselin dochází v této oblasti ke snížení proudové odezvy. Těchto zjištění by mohlo být využito pro detekci jednotlivých skupin žlučových kyselin.

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury Univerzity Karlovy (projekt GAUK 362621), Grantové agentury České republiky (projekt GAČR 19-11268S) a Specifického univerzitního výzkumu (SVV 260690).

[1] Haslewood G. A.: *J. Lipid Res. 8*, 535 (1967).
[2] Klouda J., Nesměrák K., Kočovský P., Barek J., Schwarzová-Pecková K.: *Bioelectrochemistry 134*, 107539 (2020).
[3] Klouda J., Barek J., Kočovský P., Herl T., Matysik F.-M., Nesměrák K., Schwarzová-Pecková K.: *Electrochem. Commun. 86*, 99 (2018).

CMS09
POLYKRYSTALICKÉ BOREM DOPOVANÉ DIAMANTOVÉ ELEKTRODY S KONTROLOVANÝM OBSAHEM SP^2 UHLÍKU: SPEKTRÁLNÍ A ELEKTROCHEMICKÁ CHARAKTERIZACE

Michal Zelenský[1], Jan Hrabovsky[2,3], Jan Fischer[1], Andrew Taylor[4], Karolina Schwarzová-Pecková[1]

[1]*Univerzita Karlova, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, Albertov 6, 128 00 Praha 2, Zelenskm@natur.cuni.cz*
[2]*HiLASE Centrum, Fyzikální ústav akademie věd České republiky, v.v.i., Za Radnicí 828, 252 41 Dolní Břežany*
[3]*Univerzita Karlova, Matematicko-fyzikální fakulta, Ke Karlovu 3, 121 16 Praha 2*
[4]*Fyzikální ústav, Akademie věd České republiky, v.v.i., Na Slovance 2, 182 21 Praha 8*

Elektrody z borem dopovaného diamantu (BDD) jsou dnes jedním z nejpoužívanějších materiálů v elektroanalýze, hlavně pro své vynikající vlastnosti jako je nízký nabíjecí proud a široké potenciálové okno [1]. Laserem kontrolovaná konverze sp^3 uhlíku na sp^2 uhlík umožňuje zavedení přesného obsahu i laterální distribuci sp^2 uhlíku a odemyká tak možnosti přípravy povrchů BDD elektrod pro jejich konkrétní aplikační nasazení [2].

Pro přeměnu sp^3 na sp^2 uhlík byl v této studii použit IČ laser, a to na BDD elektrody s různým stupněm dopace borem (0, 500, 1000 a 2000 ppm) a druhem předúpravy (polykrystalické, chemicky-mechanicky leštěné [3]). S využitím IČ laseru byly připraveny BDD elektrody s různým poměrem ploch sp^2/sp^3 uhlíku: 0; 0,1; 1; 5; 10; 25; 50 a 100 %.

Pro přípravu BDD elektrod s kontrolovaným obsahem a laterální distribucí sp^2 uhlíku byla nejprve nutná optimalizace laserové fluence. Ramanovou spektrometrií byla identifikovaná optimální energie laseru, kdy docházelo k fokusaci laserového toku do BDD vrstev a tím k nejúčinnější konverzi na sp^2 uhlík. Pro elektrochemickou charakterizaci byly použity redoxní sondy vnitřní (($[Fe(CN)_6]^{3-/4-}$) a vnější ($[Ru(NH_3)_6]^{3+/2+}$) sféry. Pomocí metod CV a EIS bylo zjištěno, že elektrochemické parametry jsou ovlivněny až po překročení 10 % obsahu sp^2 uhlíku.

Poděkování: Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky (GACR 23-05688S) a Univerzity Karlovy (Specifický univerzitní výzkum , projekty SVV-2023-260690 a SVV-2023-260720).

[1] Baluchová S., Daňhel A., Dejmková H., Ostatná V., Fojta M., Schwarzová-Pecková K.: Anal. Chim. Acta 1077, 30 (2019).
[2] Vlasov I., Lebedev O. I., Ralchenko V. G., Goovaerts E., Bertoni G., Van Tendeloo G., Konov V. I.: Adv. Mater. 19, 4058 (2007).
[3] Thomas E. L. H., Nelson G. W., Mandal S., Foord J. S., Williams O. A.: Carbon 68, 473 (2014).

CMS10
NANOČÁSTICE UŠLECHTILÝCH KOVŮ V PROTINÁDOROVÉ FOTOTERMÁLNÍ TERAPII

Lucie Válková[1], Lucie Hochvaldová[2], Markéta Kolaříková[1], Aleš Panáček[2], Hana Kolářová[1]

[1]*Ústav lékařské biofyziky, Lékařská fakulta UPOL, Hněvotínská 3, 775 15, Olomouc, luc.valkova@gmail.com*
[2]*Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta UPOL, 17. listopadu 12, 771 46, Olomouc*

Díky svým jedinečným biologickým vlastnostem a snadné přípravě jsou nanočástice stříbra (AgNPs) a zlata (AuNPs) využívány v mnoha vědních medicínských oblastech. Vlivem jevu povrchové plazmonové rezonance silně absorbují záření v UV/VIS a/nebo NIR oblasti spektra, což vede ke konverzi světla na teplo – tzv. fototermálnímu efektu. Toho lze efektivně využít při protinádorové fototermální terapii, kdy při teplotách nad 42 °C nádorové buňky podléhají apoptóze či nekróze.

Pro účely fototermální terapie byly syntetizovány AgNPs a AuNPs s laditelnými optickými vlastnostmi, které byly následně nadeponovány na povrch 96-jamkové kultivační desky. Na takto připravených deskách byly kultivovány buňky HeLa (karcinom děložního čípku), které byly následně ozářeny laserem o vlnové délce

odpovídající absorpčnímu maximu nanočástic. K měření růstu teploty po ozáření byla použita infračervená kamera. Ke stanovení buněčné životaschopnosti byla použita metoda MTT assay. Důležitou součástí bylo rovněž ověření vlivu samotného záření na viabilitu buněk kultivovaných na normální kultivační desce, kdy buňky při studovaných dávkách záření nebyly nikterak poškozeny. Naopak po ozáření buněk kultivovaných na desce s nadeponovanými nanočásticemi byl pozorován významný pokles viability. Na základě výsledků můžeme konstatovat, že tato relativně neinvazivní a inovativní technika založená na fyzikálně-chemických vlastnostech plazmonických nanočástic ušlechtilých kovů se nabízí jako perspektivní nástroj v boji proti rakovinným onemocněním.

Autoři děkují za finanční podporu grantu IGA_LF_2023_003.

CMS11
ELEKTROCHEMICKÁ DETEKCIA DNA G-KVADRUPLEXOV POMOCOU N-METYL MESOPORFYRÍNU AKO REDOXNEJ SONDY

Daniel Dobrovodský[1,2], Aleš Daňhel[1], Daniel Renčiuk[1], Miroslav Fojta[1]

[1]*Biofizykální ústav AV ČR, v.v.i, Královopolská 135, 612 65, Brno*
[2]*Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Kamenice 5, 625 00, Brno, danield@ibp.cz*

Elektrochemické metódy sú vynikajúcim nástrojom na analýzu nukleových kyselín, štúdium ich poškodenia, interakcií, či štruktúrnych zmien, ako sú napríklad denaturácia, či zmeny superhelicity. Oproti najčastejšie používaným spektrálnym metódam (UV-vis spektroskopia, alebo spektroskopia cirkulárneho dichroismu (CD)) sa vyznačujú zvýšenou citlivosťou, rýchlosťou a jednoduchosťou analýzy pomocou cenovo nenáročného vybavenia, možnosťou miniaturizácie a širokými možnosťami prispôsobenia [1]. Elektrochemické metódy sa dajú použiť aj na detekciu alternatívnych štruktúr DNA, ako sú napríklad G-kvadruplexy (G4). Tieto štvorreťazcové štruktúry môžu vznikať v oblastiach genómov bohatých na guanín a v živých organizmoch sa zúčastňujú regulácie dôležitých biologických procesov, ako sú transkripcia, či replikácia. Kvôli tomu sú tiež často asociované so vznikom rakoviny, čo zdôrazňuje dôležitosť vývoja analytických techník na ich detekciu [2].

V tejto práci bola vyvinutá metóda na elektrochemické štúdium G4 a ich rozlíšenie od iných DNA štruktúr založená na redukčnom signále N-metyl mesoporfyrínu (NMM) použitom ako redoxná sonda. Základné elektrochemické správanie NMM bolo charakterizované na visiacej kvapkovej ortuťovej elektróde pomocou cyklickej voltametrie. Za použitých podmienok NMM poskytovalo niekoľko redukčných signálov, z ktorých bol na jeho analýzu najvhodnejší dominantný pík III. Bolo tiež zistené, že v redukčnom procese NMM zohráva výraznú úlohu adsorbcia tejto látky na povrch elektródy. V prítomnosti DNA oligonukleotidov v roztoku NMM sa výška píku III výrazne líšila v závislosti od ich štruktúrnej formy, čo bolo využité na jednoduchú a špecifickú detekciu G4. V prítomnosti G4 bol pozorovaný niekoľkonásobne vyšší signál píku III ako pri jedno- a dvojreťazcových oligonukleotidoch. Tento rozdiel je pravdepodobne spôsobený kombinácou špecifickej interakcie NMM s G4 a nižšej hustoty adsorbovanej vrstvy G4 oligonukleotidov na povrchu ortuťovej elektródy opoti iným štruktúram [2], čo umožnuje lepší prístup NMM k povrchu elektródy a efektívnejšiu redukciu. Pomocou signálu sondy NMM bolo taktiež možné rozlíšiť jednoreťazcovú formu G4-tvoriaceho oligonukleotidu v prostredí Li^+ iónov od jeho zloženej G4 formy v prostredí K^+. Existencia jednotlivých štruktúr bola v meraných roztokoch potvrdená pomocou CD spektroskopie použitej ako referenčná metóda na štúdium štruktúry DNA. Štruktúrny prechod z denaturovanej, jednoreťazcovej formy oligonukleotidu do G4 formy v závislosti na koncentrácii K^+ bol tiež detekovaný poprvýkrát elektrochemickou metódou pomocou sondy NMM. V sérii roztokov so zvyšujúcou sa koncentráciou K^+ na úkor Li^+ bol v prítomnosti G4-tvoriaceho oligonukleotidu pozorovaný postupný nárast výšky píku III. Tento nárast veľmi dobre koreloval s nárastom charakteristického signálu v CD spektrách daných vzoriek, a zjavne reflektoval postupné skladanie G4 štruktúry.

Výsledky popísané v tejto práci môžu byť využité ako základ pre vývoj nových postupov, metód alebo biosenzorov na elektrochemickú analýzu alternatívnych štruktúr DNA.

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

Európskym fondom regionálneho rozvoja a projektom č. 22-11252S Grantovej agentúry Českej republiky.

[1] Paleček E., Bartošík M.: *Chem. Rev. 6*, 112 (2012).
[2] Spiegel J., Adhikari S., Balasubramanian S.: *Trends. Chem. 2*, 2 (2020).
[3] Dobrovodský D., Daňhel A., Mothes-Martin E., Pratviel G., Renčiuk D., Mergny J.-L., Fojta M.: *Electrochim. Acta* 442 (2023).

CMS12
TETRAKOORDINOVANÉ CO(II) KOMPLEXY ZOSTAVENÉ Z HETEROCYKLICKÝCH AROMATICKÝCH LIGANDOV

Zuzana Bielková[1], Cyril Rajnák[1], Ján Titiš[1], Ján Moncoľ[2], Alena Klokočíková[3], Roman Boča[1]

[1]*Oddelenie chémie, Ústav chémie a environmentálnych vied, Námestie J. Herdu 2, Trnava, 917 01, bielkova2@ucm.sk*
[2]*Oddelenie anorganickej chémie, Slovenská technická univerzita, Radlinského 2101/9, Bratislava, 812 37*
[3]*Katedra chémie, Fakulta prírodných vied, Univerzita Mateja Bela, Tajovského 40, Banská Bystrica, 974 01*

Medzi komplexami prechodných kovov je častá tetrakoordinácia. Pozornosť sa venuje najmä tetrakoordinovaným Co(II) komplexom, keďže mnohé z nich vykazujú správanie ako jednomolekulový magnet [1, 2]. Pripravená a podrobne študovaná bola séria tetrakoordinovaných jednojadrových Co(II) komplexov so všeobecným vzorcom $[Co(L^1)_2(X)_2]$ (**1**-**3**) and $[Co(L^2)_2(X)_2]$ (**4**-**6**), kde L^1 = 2-amino-1-metyl-benzimidazol, L^2 = 4-metylchinolín a X = Cl, Br a I. Koordinačné zlúčeniny boli charakterizované dostupnými spektroskopickými metódami a ich štruktúra bola stanovená monokryštálovou röntgenovou difraktometriou. Magnetické vlastnosti všetkých komplexov boli skúmané v statickom magnetickom poli B_{DC} = 0,1 T pomocou SQUID magnetometrie. DC magnetické dáta boli fitované spinovým Hamiltoniánom vhodným pre systémy so štiepením v nulovom poli. Axiálne parametre štiepenia v nulovom poli *D* boli v rozsahu -14,44 (**1**), -13,05 (**2**), -7,50 (**3**), -6,76 (**4**), +7,19 (**5**) a -5,58 (**6**) cm^{-1}.

Za finančnú podporu ďakujeme Slovenskej grantovej agentúre (APVV 19-0087, VEGA 1/0191/22 a VEGA 1/0086/21).

[1] Boča R., Miklovič J., Titiš J.: Inorg. Chem. 53, 5 (2014).
[2] Vassilyeva O.Y., Buvayko E.A., Kokozay V.N., Skelton B.W., Rajnák C., Titiš J., Boča R.: Dalton Trans. 48, 30 (2019).

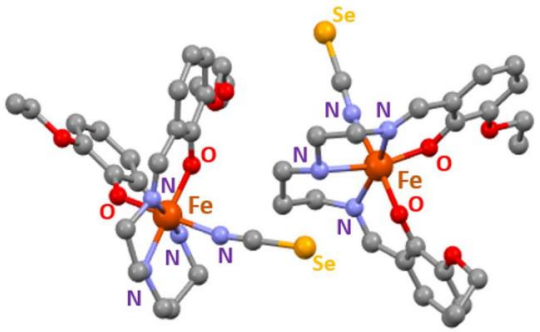
CMS13
FENOMÉN TEPLOTNE INDUKOVANÉHO JAVU OBRÁTENIA SPINU V KOMPLEXE ŽELEZA(III)

Terézia Laluhová[1], Ján Titiš[1], Erika Samoľová[2], Kevin Tran[3], Franz Renz[3], Michal Malina[4], Roman Boča[1], Cyril Rajnák[1]

[1]*Department of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, University of SS Cyril and Methodius, 917 01 Trnava, Slovakia, laluhova1@ucm.sk*
[2]*Institute of Physics of the Czech Academy of Sciences, 182 21 Prague, Czech Republic*
[3]*Institute of Inorganic Chemistry, Leibniz University, Hannover, D-30167, Germany*
[4]*Regional Centre of Advanced Technologies and Materials, Czech Advanced Technology and Research Institute, Palacký University Olomouc, Olomouc, Czech Republic*

Tento príspevok pojednáva o komplexe železa (III), ktorý vznikol reakciou substituovaného salicylaldehydu v reakcii s asymetrickým (propyl/etyl) triamínom, ktorý poskytol pendatentátny ligand typu Schiffova báza L^5 = 3-EtO-salpet, ktorá reagovala s Fe(III) centrom v prítomnosti selenokyanátu za vytvorenia cieľového komplexu $[FeIII(L^5)(NCSe)]$. Tento komplex vykazuje fenomén teplotne induko–vaného javu spinového kríženia bez prítomnosti teplotne indukovanej hysterézie. Teplota prechodu je rovná $T_{1/2}$ = 270 K. Röntgenová štrukturálna analýza, meraná pri dvoch teplotách a to *T* = 293 K a *T* = 100K potvrdila prítomnosť dvoch nezávislých jednotiek Obe komplexné jednotky majú geometriu blízku oktaédru (Obr. 1.). Centrálny atóm železa v oxidačnom stupni (+III) je v oboch jednotkách hexakoordinovaný štyrmi atómami dusíka a dvomi atómami kyslíka. Priemerná dĺžka väzby medzi atómom železa a atómom kyslíka v komplexnej jednotke vľavo je 1,87 Å a medzi atómom železa a atómom dusíka je 1,96 Å. V komplexnej jednotke vpravo je priemerná dĺžka väzby medzi centrálnym atómom Fe(III) a atómom kyslíka 1,93 Å a medzi atómom železa a atómom dusíka 2,13 Å. Práve kvôli tomuto boli tomuto komplexu kladené veľké očakávania, keďže jedna z komplexných jednotiek má podozrivo nízke dĺžky väzieb predovšetkým medzi železom a dusíkmi (Fe – N) < 2 Å. Respektíve aj dĺžky väzieb medzi železom a kyslíkovými atómami sú 1,9 ~Å. DC magnetické merania nám potvrdili že teplote *T* = 293 K obe komplexné jednotky nachádzajú vo vysokospinovom stave ale pri *T* = 100 K sa nachádza jedna komplexná jednotka v nízko–spinovom stave (*S* = 1/2) no druhá je jednotka v

stave s vysokým spinom (S = 5/2). Tieto namerané údaje boli taktiež potvrdené pomocou merania Mössbauerovej spektroskopie a zodpovedajú tiež fitovaným dátam magnetickej susceptibility.



Obr. 1 Kryštálová štruktúra komplexu 1.

Poďakovanie patrí Slovenským grantovým agentúram (APVV 19-0087, VEGA 1/0191/22 APVV-22-0007 a VEGA 1/0086/21) za ich finančnú podporu.

POSTERY - SEKCIA 1
ANALYTICKÁ CHÉMIA

1Po01
ANALÝZA BIOGENNÍCH AMINŮ V PIVECH METODOU MEPS-HPLC/UV

Martin Adam[1], Eliška Trnková[1], Aleš Eisner[1]

[1]*Katedra analytické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Martin.Adam@upce.cz*

Biogenní aminy (BA) jsou dusíkaté nízko–molekulární látky. Na základě struktury je lze rozdělit na alifatické, aromatické nebo hetero–cyklické, a podle počtu aminoskupin v molekule na monoaminy nebo polyaminy. Jsou součástí mnoha fyziologických procesů v lidském těle, avšak jejich nadměrná koncentrace může být toxická. V potravinách vznikají procesem dekarboxylace volných aminokyselin za účastí dekarboxylázy. Mezi potraviny, kde se BA vyskytují, patří maso, ryby, sýry a fermentované nápoje (pivo a víno).

BA v pivu pocházejí ze sladovnického ječmene a vznikají i při kvašení. Jejich monitorování je důležité pro odhalení mikrobiální kontaminace při výrobě piva. Pro analýzu BA se primárně využívá vysokoúčinná kapalinová chromatografie (HPLC) s různými typy detekce. Nedílnou součástí je derivatizace BA vhodným činidlem.

K analýze bylo vybráno 12 vzorků piva 4 různých druhů. Analýza byla prováděna HPLC s detekcí diodovým polem. Pro derivatizaci byl použit dansylchlorid. K zesílení signálu BA bylo testováno post-derivatizační zakoncentrování pomocí mikroextrakce tuhou fází s využitím stříkačky (MEPS). Účinnost extrakce se pohybovala od 18,6 % (tryptamin) do 53,2 % (tyramin). Ve všech analyzovaných vzorcích se vyskytovaly putrescin, kadaverin a tyramin. Nejvíce zastoupenými byly tyramin (0,50–27,80 mg/l), kadaverin (0,19–18,28 mg/l) a putrescin (0,53–1,40 mg/l). Piva svrchně kvašená měla vyšší obsah BA než spodně kvašená.

1Po02
WHITE AND BLACK ANODIC TiO_2 NANOTUBES: COMPARISON OF BIOLOGICAL EFFECTS IN NEURAL SH-SY5Y CELLS

Jana Bacova[1], Hanna Sopha[2,3], Jan Capek[1], Tomas Rousar[1], Jan M. Macak[2,3]

[1]*Department of Biological and Biochemical Sciences, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentska 573, 53210 Pardubice, Czech Republic, jana.bacova@upce.cz*
[2]*Center of Materials and Nanotechnologies, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Nam. Cs. Legii 565, 53002 Pardubice, Czech Republic*
[3]*Central European Institute of Technology, Brno University of Technology, Purkynova 123, 61200 Brno, Czech Republic*

We evaluated the cytotoxicity of black TiO_2 nanotubes in comparison to their white counterparts for the first time. The TiO_2 nanotube layers were prepared by anodic oxidation of Ti foils and investigated in the as-prepared white form, and in the black form, achieved by reduction of Ti and TiO_2. A part of the black TiO_2 nanotube

layers was coated with a TiO_2 layer by Atomic Layer Deposition (ALD).

Neural SH-SY5Y cells were exposed to a wide range of TiO_2 nanotube concentrations for 24 and 48 h. Then, the cytotoxicity was evaluated using an assessment of dehydrogenase activity and glutathione assay and compared to multi-walled carbon nanotubes. Changes in cell morphology were observed using fluorescence microscopy. We found no decrease of dehydrogenase activity after incubation of cells with TiO_2 nanotubes up to 200 µg/mL. 100 µg/mL black TiO_2 nanotubes reduced glutathione level compared to black TiO_2 nanotubes coated with TiO_2 layer. On the other hand, MWCNTs caused a large cell impairment.

In conclusion, ALD TiO_2 coating on the black TiO_2 nanotubes caused the disappearance of mild toxic effects of white and black TiO_2 nanotubes due to the shading of carbon and fluorine species incorporated within the TiO_2 nanotube walls.

This study was supported by OP RDE project with acronym NANOBIO, reg. no. CZ.02.1.01/0.0/0.0/17_048/0007421.

1Po03
MINIATURIZOVANÝ AMPEROMETRICKÝ DETEKTOR S KOVOVOU REFERENČNÍ ELEKTRODOU

Martin Baroch[1], Hana Dejmková[1]

[1]*Univerzita Karlova, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO Laboratoř elektrochemie životního prostředí, Albertov 6, 128 00 Praha 2, Česká republika, martin.baroch@natur.cuni.cz*

Konstrukční požadavky, kladené na průtokové detektory, občas představují výzvu pro vhodné zapojení zejména klasických referenčních elektrod – jejich komplexní konstrukce vyžaduje umístění do speciálních oddělení detekční cely a ohledy na jejich tvar a přítomnost vodivého spojení vnitřního roztoku s detekčním prostorem. Zajímavou alternativu v tomto ohledu představují kovové referenční elektrody, kterými jsme se nedávno extenzivně zabývali [1]. Tyto referenční elektrody mají tu výhodu, že jejich potenciál je odvislý od pH elektrolytu [2]. To je ve většině případů i tak nutné kontrolovat, aby se analyt nacházel v požadované chemické formě a podléhal pouze požadované elektrochemické reakci.

Předkládaná práce ukazuje možnost zapojení těchto elektrod do detekčních cel s již dříve používanými pracovními elektrodami, zejména z uhlíkové plsti a porézního borem dopovaného diamantu, a porovnání parametrů takto upravených detekčních systémů při použití jednoduchých redoxních systémů jako ferrocene methanol nebo hexachloroiridičitan draselný. Hlavními sledovanými parametry jsou vliv použitých miniaturizovaných detektorů na rozmývání zón vzorků, tvar signálů a z nich získaných hydrodynamických voltamogramů a stupeň konverze. Výsledky získané na těchto detektorech jsou pak porovnávány s běžně používanými detektory na bázi uhlíkových materiálů.

Tento projekt byl podpořen z projektu GAČR 23-05688S a z prostředků Specifického vysokoškolského výzkumu číslo SVV260690.

[1] Baroch M., Míka L., Dejmková H.: *Application of Metal Reference Electrodes* ve sborníku 42. Moderní elektrochemické metody, str. 14 – 17, BEST Servis, Ústí nad Labem, 2023

[2] Głab S., Hulanicki A., Edwall G., Ingman F.: *Crit. Rev. Anal. Chem. 21*, 29 (1989).

1Po04
MULTIPRVKOVÁ ANALÝZA POMOCOU AAS SPEKTROMETRA

František Čacho[1], Jakub Masác[1]

[1]*Ústav analytickej chémie, FCHPT STU, Radlinského 9, 812 15 Bratislava, frantisek.cacho@stuba.sk*

Táto práca opisuje vývoj metódy pre simultánne stanovenie kadmia, kobaltu, železa, niklu a cínu vo vzorkách vôd realizované atómovým absorpčným spektrometrom s vysokým rozlíšením a kontinuálnym zdrojom žiarenia.

Pre kadmium bola v tomto návrhu zvolená jeho primárna spektrálna čiara pri 228,8018 nm a pre kobalt, železo, nikel a cín boli zvolené ich sekundárne spektrálne čiary pri 228,7810 nm, 228,7250 nm, 228,8400 nm a 228,6680 nm. Simultánna analýza sa uskutočňovala pri teplote pyrolýzy 700 °C a teplote atomizácie 2600 °C. Pri týchto teplotách boli maximálne zohľadnené odlišné termochemické vlastnosti skúmaných prvkov.

Pre Cd, Co, Fe, Ni a Sn boli stanovené nasledovné hodnoty medze dôkazu: 0,27 µg/L, 1,08 µg/L, 0,68 µg/L, 5,40 µg/L a 0,60 µg/L. Za účelom určenia správnosti a využiteľnosti navrhnutej metódy boli analyzované reálne vzorky odpadových vôd rôzneho pôvodu.

Táto práca bola podporovaná Vedeckou grantovou agentúrou VEGA MŠ SR a SAV (projekt č. 1/0159/20 a projekt č. 1/0017/23). Táto práca bola podporená

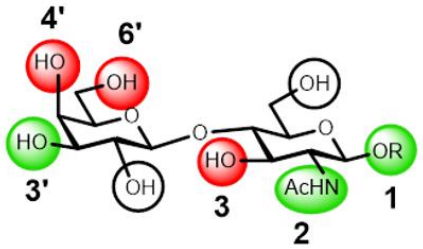
Agentúrou pre výskum a vývoj pod číslom projektu APVV-21-0211.

1Po05
VOLTAMETRICKÉ CHOVÁNÍ FERROCENOVÝCH GLYKOMIMETIK A STUDIUM JEJICH INTERAKCE S GALEKTINEM-1 POMOCÍ ELEKTRODY Z PYROLYTICKÉHO GRAFITU

Lucie Žaloudková[1], Vojtěch Hamala[2], Veronika Ostatná[1], Jindřich Karban[2], Aleš Daňhel[1]

[1]Oddělení biofyzikální chemie a molekulární onkologie, Biofyzikální ústav AV ČR, Královopolská 135, 612 00 Brno, Česká republika, danhel@ibp.cz
[2]Výzkumná skupina Bioorganické chemie a biomateriálů, Ústav chemických procesů AV ČR, Rozvojová 135, 165 00, Praha 6, Česká republika

Galektiny jsou proteiny vázající sacharidy a účastní se řady fyziologických procesů (záněty, reakce imunitního systému, migrace buněk, autofágie a signalizace). Chemická modifikace přirozených ligandů galektinů (glykomimetika) nabízí alternativní přístup k vývoji nových terapeutik. Glykomimetika mohou nahradit přirozené vazebné partnery galektinů a také nabízí zvýšenou enzymatickou stabilitu, biologickou dostupnost i vyšší afinitu a selektivitu [1]. Nově syntetizovaná glykomimetika jsou založena na modifikacích disacharidových struktur (Lac, LacNAc a thiodigalaktoza) [2]. Jako výhodné substituce se jeví aromatické funkční skupiny, v pozici 3‘-OH, kde dochází k přímým interakcím aromatického substituentu a proteinu. Naproti tomu, 3- , 4‘- a 6‘- hydroxyly se zdají být podmínkou pro vazbu. Ty v pozicích 1- a 2- a 3‘-, jsou vhodné pro modifikaci (Obr. 1) [3].



Obr. 1 Pozice hydroxylů nových glykomimetik

Tato práce se zabývá voltametrickým (CV a SWV) studiem glykomimetických ligandů modifikovaných ferrocenem a jejich interakcí s galektinem-1 pomocí elektrod z pyrolytického grafitu, a to v „basální“ i „edge“ orientaci. U vybraných glykomimetik byl charakterizován mechanismus elektrodové reakce, adsorpce na příslušnou elektrodu a koncentrační závislosti společně s limitem detekce. Pomocí SWV byla také testována možnost měření interakce studovaných látek s galektinem-1 na bPGE.

Tato práce vznikla za finanční podpory Grantové agentury České republiky (projekt 23-06115S).

[1] Tamburrini A., et al.: *Med. Res. Rev. 40*, 2 (2020).
[2] Bertuzzi S., et al.: *Front. Chem. 8* (2020).
[3] Skoupilova H., et al.: *Eur. J. Pharmacol. 867*, 172825 (2020).

1Po06
STANOVENÍ PESTICIDŮ VE VODÁCH V REŽIMU MRM

Aleš Eisner[1], Martin Adam[1]

[1]Univerizta Pardubice, fakulta chemicko-technologická, katedra analytické chemie, Stavařov 573, 532 10 Pardubice, ales.eisner@upce.cz

Pro stanovení pesticidů z vodných vzorků byla zvolena kombinace SPME ve spojení s GC-MS v režimu MRM. Optimalizace separačních podmínek byla provedena na standardní směsi EPA 8081 obsahující 22 pesticidů. Na základě měření uměle obohaceného vzorku bylo pro SPME vybráno jako nejvhodnější vlákno 75 µm CAR/PDMS. Dále byla provedena optimalizace parametrů (inkubační teplota, extrakční čas a množství NaCl). Podmínky pro jednotlivé experimenty byly navrženy a následně vyhodnoceny pomocí programu Statistica 12 (navrhování experimentu (DOE) metodou centrálně kompozitního plánování (CCD)). Jako optimální byla vyhodnocena nejvhodnější inkubační teplota 80 °C po dobu 62 minut s množstvím 0,7 g NaCl.

Navržená metoda byla otestována na uměle kontaminovaných vzorcích a byla potvrzena správnost navrženého modelu. Následně byla tato metoda aplikována na reálné vzorky povrchových vod odebraných v okolí Jablonného nad Orlicí. Jednalo se o vzorky tekoucích vod (Tichá Orlice a Orličkovský potok) a stojatých vod (rybník v Bystříčku, Vávrův lom, rybník a vodní nádrž v Jamném nad Orlicí).

Ve všech analyzovaných vzorcích se podařilo identifikovat několik pesticidů nad mezí detekce. Většina vzorků se pohybovala pod mezí kvantifikace. Pouze u vzorku Tiché Orlice se koncentrace cis-chlordanu a endrin ketonu pohybovala v jednotkách ng/ml.

1Po07
ZLEPŠENIE PRIESTOROVÉHO ROZLÍŠENIA LIBS URČOVANÍM ROZMEROV ABLAČNÝCH KRÁTEROV

Daniel Haško[1]

[1]*Centrum vedecko-technických informácií SR, Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava, daniel.hasko@cvtisr.sk*

Spektroskopia laserom indukovanej plazmy (LIBS) je známou a overenou metódou na kvalitatívnu a kvantitatívnu analýzu materiálov v rôznych fyzikálnych skupenstvách. Na vytvorenie vysokoteplotnej mikroplazmy sa využíva sfokusovanie intenzívneho laserového impulzu na povrch vzorky. Následná spektrálna analýza vytvorenej emisie slúži na identifikáciu atómového/prvkového zloženia vzorky. Niektoré efekty, ktoré vznikajú pri tvorbe mikroplazmy, nie sú stále detailne popísané, preto ich je potrebné preskúmať. Neustály vývoj v oblasti laserov, detektorov i spektrometrov umožňuje využívať LIBS v najrôznejších nových oblastiach, ako aj pri skúmaní progresívnych materiálov. V tomto príspevku sa zameriavame na zlepšenie priestorového rozlíšenia LIBS pri mapovaní vzoriek (t. j. hĺbkového rozlíšenia na úrovni stoviek nanometrov) pre rôzne materiály v tuhom skupenstve. Na dosiahnutie laserovej ablácie boli využité nanosekundové (ns) a pikosekundové (ps) laserové impulzy s čiastočne rozostreným laserovým zväzkom. Zo získaných výsledkov je zrejmé, že krátery vytvorené ps laserom pripomínajú okrúhle otvory s prstencami na okrajoch, zatiaľ čo krátery vytvorené ns laserom majú oválny tvar s ostrejším okrajom. V budúcnosti by sme sa chceli zamerať na LIBS merania tenkých vrstiev vytvorených na hladkých povrchoch pomocou ps DPSS lasera s vyššou opakovacou frekvenciou.

Táto práca bola finančne podporená Vedeckou grantovou agentúrou Ministerstva školstva, vedy, výskumu a športu SR č. VEGA-1/0803/21. Chcel by som sa tiež poďakovať prof. Pavlovi Veisovi z FMFI UK za poskytnutie prezentovaných vzoriek.

[1] Afgan, M.S. et al., *J. Anal. At. Spectrom.* 32, 1905-1915 (2019).
[2] Gardette, V. et al., *Anal. Chem.* 95 (1), 49-69 (2023).

1Po08
STANOVENÍ HMOTNOSTNÍ AKTIVITY VYBRANÝCH PŘÍRODNÍCH RADIONUKLIDŮ V POTRAVINÁCH

Alena Kelnarová[1], Eva Schlesingerová[1], Helena Pilátová[1]

[1]*Státní ústav radiační ochrany Praha, Bartoškova 28, alena.kelnarova@suro.cz*

Ingesční dávka ionizujícího záření z přírodních radionuklidů je způsobená téměř výhradně ^{210}Po, ^{210}Pb, ^{228}Ra a ^{226}Ra, ostatní radionuklidy přeměnových řad uranu a thoria přispívají k dávce minimálně. Znalost obsahu přírodních radionuklidů v potravinách v České republice je poměrně omezená. V rámci monitorování podle Vyhlášky o monitorování radiační situace č.360/2016 Sb. se v ČR stanovují pouze aktivity ^{137}Cs, ^{90}Sr a ^{40}K ve smíšené stravě. Cílem této práce bylo stanovení ^{226}Ra a ^{228}Ra v identických vzorcích jako jsou vzorky smíšené stravy analyzované pro potřeby monitorování radiační situace. Byla vypracována metoda využívající roztoky a sraženiny vznikající v různých fázích postupu separace ^{90}Sr. Aktivita ^{228}Ra se pak měří ve sraženině síranu radnato-barnatého po ustanovení rovnováhy ^{228}Ra s ^{228}Ac spektrometrií gama s vysokým rozlišením. Aktivita ^{226}Ra se měří po ustanovení rovnováhy s ^{222}Rn v Lucasových komorách.

Výsledky analýz vzorků smíšené stravy z let 2021-2023 jsou pro ^{226}Ra v průměru 23,5 mBq/kg nativní hmotnosti stravy (rozmezí 6,9-41,2) a pro ^{228}Ra 30,4 mBq/kg nativní hmotnosti stravy (rozmezí 13,4-57,3). Bylo provedeno i stanovení hmotnostních aktivit izotopů radia, uranu a ^{210}Pb v nejvíc zastoupených položkách stravy jako je maso, mléko, chleba, zelenina a ovoce. Výsledky jsou porovnány s referenčními hodnotami, které stanovil UNSCEAR ve své zprávě z roku 2000.

Tento příspěvek vznikl za podpory MV ČR.

1Po09
STUDIUM POROZITY UHLÍKATÝCH MATERIÁLŮ POMOCÍ LOW-FIELD NMR RELAXOMETRIE

Patrik Kopčan, Eva Kinnertová

Ostravská univerzita, Přírodovědecká fakulta, Katedra chemie, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava,

patrik.kopcan2000@gmail.com

Metoda low-field ^{1}H NMR relaxometrie je vysoce citlivá na jádra ^{1}H kapaliny vyplňující póry, z tohoto důvodu se stává v poslední době stále

populárnější technikou při studiu mnoha porézních materiálů. Cílem tohoto příspěvku bylo posoudit vhodnost metody NMR relaxometrie ke studiu porozity uhlíkatých materiálů.

Za tímto účelem byly pomocí relaxometrie zkoumány zpyrolyzované vzorky resorcinol-formaldehydových xerogelů připravených metodou EISA („evaporation induced self-assembly“) s různým poměrem prekurzoru (resorcinol) ku templátu (Pluronic® F-127), p/t. Vzorky byly před NMR analýzou smočeny různým množstvím vody. Porozita byla zkoumaná pomocí termoporometrie a adsorpce dusíku.

Výsledky termoporometrie prokázaly meso–porézní charakter materiálů. S klesajícím poměrem p/t byl zjištěn posun píku tání k vyšším teplotám, což naznačuje růst průměrné velikosti mezopórů.

Data z relaxometrie byla převedena pomocí inverzní Laplaceovy transformace na distribuci relaxačních časů. Po srovnání distribuce relaxačních časů s velikostmi pórů byla distribuce rozdělena přibližně do pěti intervalů. Interval pod 10 ms přísluší mikropórům, 10 až 100 ms zřejmě mezopórům, do 500 ms makropórům, 500 až 1500 ms vodě mezi zrny a nad 2000 ms kapalině v bulku.

Obr. 1 Distribuce relaxačních časů T_2 nejvíce smočeného vzorku.

1Po10
VYUŽITÍ ADSORPCE NA MAGNETICKÝCH MATERIÁLECH PŘI PŘÍPRAVĚ VZORKŮ PŘÍRODNÍCH VOD KE STANOVENÍ STOPOVÝCH MNOŽSTVÍ IONTŮ TĚŽKÝCH KOVŮ

Kateřina Krtková[1], Martin Mucha[1]

[1]*Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita, 30.dubna 22, 701 03 Ostrava, katka.krtkova@seznam.cz*

Kontaminace životního prostředí ionty těžkých kovů je v současnosti intenzivně zkoumaný problém, především v případě přírodních vod v průmyslových oblastech. Ionty těžkých kovů v přírodních vodách mohou být nebezpečné i při velmi nízkých koncentracích z důvodu jejich akumulace v organismech, proto je důležité i tyto velmi nízké koncentrace spolehlivě stanovit. Mezi široce používané metody stanovení iontů kovů patří atomová absorpční spektrometrie, často však citlivost těchto metod není dostatečná a vzorky před analýzou je potřeba upravit a zakoncentrovat. Adsorpce na vhodném materiálu s následným uvolněním iontů do menšího objemu extrakčního činidla ve srovnání s extrahovaným objemem vzorku je jednou možností. V této práci byl jako adsorbent připraven magnetit a jeho nanokompozit s vermikulitem, pro srovnání byly dále použity vermikulit a aktivní uhlí. U všech materiálů byla před experimenty ověřena kontaminace zkoumanými ionty těžkých kovů. Dále byly zjištěny extrakční účinnosti materiálů pro Cu^{2+}, Pb^{2+} a Cd^{2+} ionty.

Práce vznikla za podpory projektu SGS č. SGS12/PřF/2023 „Syntéza, charakterizace a aplikace porézních materiálů II“.

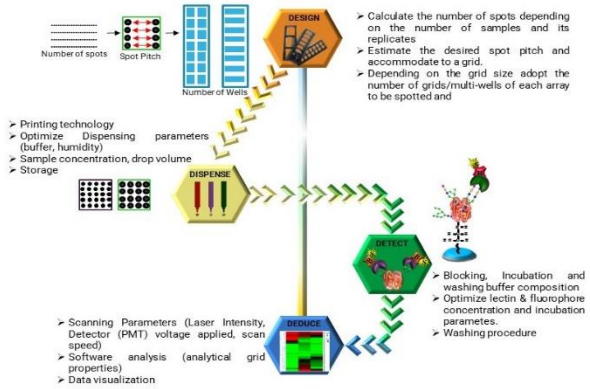
1Po11
MICROARRAY BIOSENSING IN GLYCOMICS ADOPTING 4D APPROACH

Paras H. Kundalia[1], Lucia Pažitná[1], Kristína Kianičková[1], Eduard Jáné[1], Lenka Lorencová[1], Jaroslav Katrlík[1]

[1]*Department of Glycobiotechnology, Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, SK-84538 Bratislava, Slovakia, chemjkat@savba.sk*

Glycosylation happens to be a customary post-translation modification (PTM) in all eukaryotes. Thus it becomes imperative to discern these carbohydrate-protein interations and their manifestations in in endogenous biological processes, immune defense mechanisms, microbe-host interactions and various pathological conditions. Microarray based glycoprofiling has become the mainstay for achieving throughput. The precise recognition of target glycan ligands among the plethora of others is central for any glycan-targeting probe being tested by microarray analyses. Since the adoption of microarray as tool for high-throughput glycoprofiling a number of customized array platforms possessing different assemblies such as slide-surface chemistries, linkers, glycan/lectin presentation, densities, printing technologies and conditions and so on have been developed. All these tailor-made arrays were principally aimed to interrogate protein–

carbohydrate interactions, each of their respective customizations, from array fabrication to experimental analysis, scanning, data analysis and reporting led to several differences or inconsistencies in cross-platform comparison. Understanding the various intrinsic and extrinsic factors influencing microarray analyses we hereby propose a 4D approach (Design–Dispense–Detect–Deduce) to minimize the effect of these extrinsic factors on glycomics microarray analyses, streamline cross-platform analyses and comparisons and thereby aid in optimizing microarray analyses for glycomics.



Obr. 1 4D approach adopted to optimize factors contributing to variability in microarray analysis

We would like to acknowledge the funding obtained for this work from: VEGA 2/0120/22 and APVV-20-0243.

[1] Kundalia P., Pažitná L., Kianičková K., Jáné E., Lorencová L., Katrlík J.: *Sensors 23*, 5362 (2023).
[2] Kianičková K., Pažitná L., Kundalia P., Pakanová Z., Nemčovič M., Baráth P., Katrlíková E., Šuba J., Trebatická J., Katrlík J.: *Int. J. Mol. Sci., 24*,8745 (2023).
[3] Penezić A., Križakova M., Miljuš G., Katrlik J., Nedić O.: *Proteomics Clin. Appl. 13*, 1800185 (2019)

1Po12
FORENZNÁ APLIKÁCIA CHROMATOGRAFICKÉHO STANOVENIA BENZODIAZEPÍNOV

Alica Várfalvyová[1,2], Barbora Benická[1], Elena Kupcová[1]

[1]*Univerzita Mateja Bela v Banskej Bystrici, Fakulta prírodných vied, Katedra chémie, Tajovského 40, 974 01 Banská Bystrica, elena.kupcova@umb.sk*
[2]*Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, Prírodovedecká fakulta, Katedra analytickej chémie, Moyzesova 11, 040 01 Košice*

Benzodiazepíny (BZD) patria medzi najfrekventovanejšie predpisované anxiolytiká, hlavne pri liečbe úzkostí a nespavosti. Už krátkodobé užívanie spôsobuje psychickú či fyzickú závislosť, v dôsledku čoho dochádza k zneužívaniu BZD a ich ilegálnej distribúcii [1]. V dôsledku takmer okamžitého nástupu účinkov po užití a ich synergickému účinku s alkoholom BZD často vystupujú na pozadí rôznych trestných činov a ich rýchle stanovenie je nevyhnutné nielen pre toxikologické, ale aj forenzné účely. Pre dokázanie kriminálnej aktivity je často potrebná analýza zvyškov alkoholických nápojov [2]. Separáciu s následnou identifikáciou a kvantifikáciou zmesi benzodiazepínov možno dosiahnuť pomocou chromatografických metód. V tejto práci sa venujeme optimalizácii a porovnaniu troch chromatografických metód – tenkovrstvovej, kvapalinovej a plynovej chromatografii - s rôznymi typmi detekcie pre stanovenie zmesi vybraných BZD (alprazolam, bromazepam, diazepam, oxazepam). Optimálna metóda je následne aplikovaná pre stanovenie BZD v alkoholických nápojoch.

[1] Hockenhull J. et al.: *Br. J. Clin. Pharmacol. 87*, 1676 (2021).
[2] Vincenti F. et al.: *Forensic. Chem. 23*, 100327 (2021)

1Po13
SELENIUM APPARENTLY HELPS AGAINST CORONAVIRUSES

Alena Manová[1], Kristína Vodičková[1], Miroslav Rusko[2]

[1]*Slovenská technická univerzita, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav analytickej chémie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, alena.manova@stuba.sk*
[2]*Katolícka univerzita v Ružomberku, prorektor pre vedu a umenie*

SARS-CoV-2 is the RNA virus responsible for the COVID-19 pandemic, which has claimed more than 3 million victims of all ages, races, and from all geographical regions worldwide. Selenium, a natural trace element, plays a key, complex and indispensable role in the immune system. Selenium deficiency is associated with a higher susceptibility to viral RNA infections and a more severe course of the disease. In the initial chapters of this paper, we present information about selenium, its toxicity, and biochemical functions. We also performed a literature search on the possible dependencies between selenium levels in the bodies of COVID-19 patients and their recovery or death rates. The first study looked at the state of various nutrients in 50 hospitalized patients with COVID-19. Selenium deficiency was

confirmed in 42%. In another study, we focused on selenium levels in healthy individuals and in patients with Covid-19 in the South Indian population. Analyses of serum selenium levels in 30 healthy people and in 30 patients with confirmed COVID-19 infection have been reported. Patients demonstrated significantly lower selenium levels of 69.26 ± 8.78 ng/mL compared to healthy individuals who showed levels of 79.09 ± 10.9 ng/mL. A study focused on a comprehensive analysis of nine trace elements in urine for COVID-19 suggests that variations in urinary selenium levels were closely associated with severe disease and the fatal consequences of COVID-19. The last selected study on selenium deficiency associated with the risk of viral mortality reported that patients who tested positive for COVID-19 showed blood selenium deficiency along with low selenoprotein P concentrations and low enzymatic activity of secreted GPx3. Taken together, these studies suggest that low levels of selenium in the body are a common finding in conditions considered vulnerable to the more severe COVID-19, especially in case of the elderly.

We gratefully acknowledge the support provided by the Slovak Granting Agency VEGA (Project 1/0159/20).

1Po14
LA-ICP-MS IN MEDICAL RESEARCH

Martina Machalová[1,2], Michaela Vašinová Galiová[1,2], Tibor Stračina[3]

[1]*Institute of Chemistry and Technology of Environmental Protection, Faculty of Chemistry, Brno University of Technology, Purkyňova 464/118, 612 00, Brno, 204031@vutbr.cz*
[2]*BIC Brno, Purkyňova 648/125, 612 00, Brno*
[3]*Department of Physiology, Faculty of Medicine, Masaryk University, Kamenice 753/5, 625 00, Brno*

Laser ablation inductively coupled plasma mass spectrometry (LA-ICP-MS) has been increasing in a use and expanding in terms of its application portfolio, such as elemental bioimaging. The elemental distribution investigation within a soft tissue could help to improve a disease diagnostic, for example myocardial fibrosis. Myocardial fibrosis is one of the consequence and cause of heart failure for which there exists no effective medical care. The solution would be predicting the fibrosis and preventive therapy. Cardiac magnetic resonance (CMR) is widely used in this field, however, still cannot predict and detect myocardial fibrosis in time. This study aims to analyse the distribution of elements in rat hearts with artificially induced myocardial fibrosis. Within this study, an appropriate LA-ICP-MS methodology has been developed to identify the changes in elemental distribution as a result of myocardial fibrosis via comparison healthy and fibrotic tissue and to locate the fibrotic tissue. Moreover, the influence of sample staining on calcium, manganese, copper, and zinc distribution was also investigated. The distribution of iron specifically seems to be helpful in recognizing a damaged myocardium.

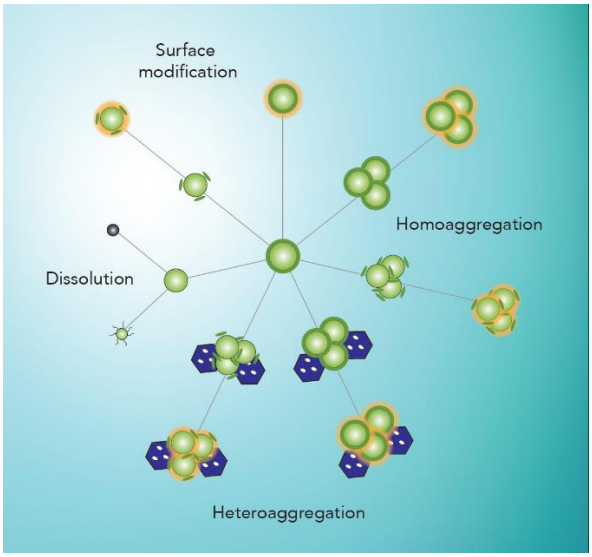
The work was supported by the project FCH-S-23-8297 of Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic.

1Po15
ANALYTICKÁ CHARAKTERIZÁCIA NANOMATERÁLOV VO VZORKÁCH SO ZLOŽITOU MATRICOU

Ján Labuda[1], Veronika Svitková[1]

[1]*Ústav* analytickej chémie FCHPT, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, ja*n.labuda@stuba.sk*

Charakterizácia inžiniersky pripravovaných nanomateriálov vyžaduje interdisciplinárne prístupy a multimodálne analytické metódy. Dostupným sa stáva tiež metrologické zabezpečenie vrátane referenčných materiálov a validácie štandardných skúšobných metód. Sledujú sa vzorky environmentálneho pôvodu, potraviny, kozmetika, predmety dennej potreby a vzorky biologického pôvodu [1]. Nanomateriály v týchto matriciach podliehajú rôznym zmenám (obr. 1).



Obr. 1 Možné zmeny foriem výskytu nanomateriálov v zložitej matrici.

Medzi obvyklými analytmi a nanomateriálmi sú základné rozdiely: popri určení chemického zloženia je potrebné určiť fyzikálne parameter zahrňujúce veľkosť, tvar a štruktúru. Mnohé metódy schopné analýzy chemického zloženia s rozlíšením v nanoškále nie sú rutinne dostupné či používané, napríklad pre analýzu nanočastíc so zložitou štruktúrou jadra a obalu alebo pre analýzu povrchového pokrytia.

Výzvou pre analytikov sú techniky spôsobujúce minimálne zmeny pri vzorkovaní a samotnej analýze, vývoj postupov úpravy vzorky bez jej denaturácie a deaglomerácie, on-line frakcio–načných a predkoncentračných techník, a v ne–poslednom rade analytických techník schopných rozlíšiť pripravované a prostredím trans–formované nanomateriály.

Práca bola podporená projektami IUPAC Project 2017-005-3-500 a Vedeckej grantovej agentúry VEGA (1/0159/20).

[1] Labuda J., Barek J., Gajdosechova Z., Goenaga-Infante H., Johnston L., Mester Z., Shtykov S.*: Pure Appl. Chem. 95*, 133 (2023).

1Po16
STANOVENÍ KATECHOLAMINŮ A METANEFRINŮ Z TĚLNÍCH TEKUTIN V DIAGNOSTICE FEOCHROMOCYTOMU A PARAGANGLIOMU

Alice Markvartová[1], Jiří Widimský jr.[1], Tomáš Zelinka[1], Jan Škrha sr.[1], Michal Vrablík[1]

[1]3. interní klinika, 1. LF UK a VFN, Univerzita Karlova, Česká Republika, alice.markvartova@lf1.cuni.cz

Stanovení katecholaminů - noradrenalinu (NA), adrenalinu (A) a dopaminu (D) a jejich metabolitů metanefrinů - normetanefrinu (NMN), metanefrinu (MN) a 3-methoxytyraminu (3-MT) z tělních tekutin, je využíváno k diagnostice nádorů typu feochromocytomu a paragangliomu (PPGL). PPGL jsou nádory dřeně nadledvin nebo také extraadrenální-paragangliomy. PPGL mohou mít benigní i metastatický charakter a syntetizují, ukládají, metabolizují a často rovněž vylučují katecholaminy. Proto lze zvýšené koncentrace uvedených látek využít v jejich diagnostice. Existuje více různých druhů (fenotypů) PPGL. Fenotyp adrenergní produkuje převážně A, resp. MN, fenotyp noradrenergní, produkuje převážně NA, resp. NMN a fenotyp smíšený, který sekretuje ve zvýšené míře oba analyty současně. Pro zjištění přítomnosti PPGL jsou využívány především NA a /nebo A, respektive NMN a /nebo MN. V případě metastatických PPGL může poskytnout doplňující diagnostické informace D nebo 3-MT, jejichž koncentrace mohou být v těchto případech zvýšené.

Zaměřili jsme se na porovnání výsledků stanovení třech skupin metabolitů a to katecholaminů z moče, metanefrinů z moče a metanefrinů z krevní plazmy ve vztahu k diagnostice PPGL. Testováno bylo dvacet pacientů, z toho šestnáct s PPGL, čtyři bez přítomnosti nádoru typu PPGL.

Metanefriny z moče byly stanovovány po hydrolytickém uvolnění z konjugované formy, ostatní metabolity byly stanovovány ve volné formě. Všechny analyty byly separovány z biologické matrice pomocí extrakce na pevné fázi (SPE) a poté stanoveny metodou vysokoúčinné kapalinové chromatografie (HPLC) s elektrochemickou detekcí (ED).

Při závěrečném porovnání bylo zjištěno, že v několika případech se výsledky stanovení sledovaných skupin metabolitů neshodují a neodpovídají diagnóze. Byla potvrzena vyšší diagnostická výtěžnost MN a NMN v plazmě i v moči oproti močovým katecholaminům. Zároveň lze, na základě našich výsledků, vyzdvihnout stanovení metanefrinů z plazmy v diagnostice PPGL. Naše závěry se shodují s údaji v literatuře.

Děkujeme za podporu programu Cooperatio, vědní oblasti „Metabolic Diseases“.

[1] Pacák K., Habilitační práce, 1. LF UK Praha (2002).
[2] Vránková A., Škramlíková T., Widimský J.jr, *Chem. Listy* 104, 251 (2010).

1Po17
STANOVENIE JODIDOV VO VZORKÁCH VÔD S VYSOKÝM OBSAHOM CHLORIDOV

Jakub Masác, František Čacho

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

Na stanovenie jodidov bola použitá metóda vnútroelektródovej coulometrickej titrácie s využitím prietokového systému EcaFlow GLP 150. Samotné stanovenie jodidov pozostávalo z viacerých krokov, ktoré boli vykonané automaticky v objeme pracovnej elektródy z porézneho sklovitého uhlíka. Po naplnení elektródového priestoru analyzovaným roztokom sa na elektródu vložil vhodný potenciál. Pri týchto podmienkach sa jodidy v objeme elektródy

oxidovali na jód a môže sa teda hovoriť o elektrochemickom generovaní jódu z jodidov v objeme elektródy. Následne bol vygenerovaný jód v elektróde redukovaný na jodidy, pričom redukcia poskytla merateľný signál zodpovedajúci množstvu generovaného jódu a teda aj koncentrácii jodidov v analyzovanom roztoku. Metóda je lineárna od 0,2 do 50 mg L^{-1} s LOD = 0,03 mg L^{-1} a LOQ = 0,09 mg L^{-1}. Bolo sledovaných 10 interferentov, z pomedzi ktorých sa ukázali ako problematické len Fe(III) a Br(-I). Metóda bola úspešne použitá na stanovenie jodidov v siedmych reálnych vzorkách vôd.

Táto publikácia vznikla vďaka podpore v rámci Operačného programu Integrovaná infraštruktúra pre projekt: „Strategický výskum v oblasti SMART monitoringu, liečby a preventívnej ochrany pred koronavírusom (SARS-CoV-2)", Kód ITMS2014+: NFP313011ASS8, spolufinancovaný zo zdrojov Európskeho fondu regionálneho rozvoja. Práca bola podporovaná aj Vedeckou grantovou agentúrou VEGA MŠ SR a SAV (projekt č. 1/0159/20 a projekt č. 1/0017/23). Táto práca bola podporená Agentúrou pre výskum a vývoj pod číslom projektu APVV-21-0211.

1Po18
ELECTROCHEMICAL IMPEDANCE SPECTROSCOPY FOR THE QUANTITATIVE DETERMINATION OF DRUGS

Oleksandr Matvieiev[1], Renáta Šelešovská[1], Marian Vojs[2], Pavlína Kelíšková[1], Lenka Janíková[1], Jaromíra Chýlková[1]

[1]University of Pardubice, Faculty of Chemical Technology, Institute of Environmental and Chemical Engineering, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Czech Republic, oleksandr.matvieiev@student.upce.cz
[2]Slovak University of Technology in Bratislava, Faculty of Electrical Engineering and Information Technology, Institute of Electronics and Photonics, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, Slovak Republic

Electrochemical methods have emerged as valuable tools for drug analysis due to their sensitivity, selectivity, and potential for quantitative determination. Voltammetric methods offer several advantages in drug analysis, including their ability to provide information on drug redox properties, kinetics, and stability [1]. Among these techniques, electrochemical impedance spectroscopy (EIS) has gained prominence for its ability to probe the electrochemical behavior of drug molecules in solution [2].

By leveraging the principles of EIS, which involves measuring the impedance response of an electrochemical system as a function of frequency, valuable insights into drug concentration can be obtained. Changes in the drug concentration can induce variations in the impedance spectrum, including resistance, capacitance, and inductance, which can be correlated to the drug concentration [2].

In this work, we will compare the classical voltammetric analysis with electrochemical impedance spectroscopy (EIS) for determining the concentration of substances. By investigating the dependency of relevant parameters on concentration, we will demonstrate how the classical voltammetric method and EIS can be utilized for the quantitative determination of substance concentration. Our investigation will contribute to understanding the advantages and limitations of each technique and their potential for accurate and sensitive determination of substance concentration in different systems.

This work was supported by the University of Pardubice (project No. SGSFChT_2023_002) and Slovak VEGA grants number 1/0554/20 and 1/0631/22.

[1] Barek J., Opekar F., K. Štulík K.: *Elektroanalytická chemie*, Karolinum, Praha (2005).
[2] Bertok T., Lorencova L., Chocholova E., Jane E., Vikartovska A., Kasak P., Tkac J.: *ChemElectroChem* 6, 989 (2019).

1Po19
ROZKLAD PEVNÝCH VZORKŮ POMOCÍ AUTOMATICKÉ TAVIČKY KATANAX

Ondřej Pařízek[1]

[1]Státní ústav radiační ochrany Praha, Bartoškova 28, ondrej.parizek@suro.cz

Potřeba vyvíjet rychlé analytické metody pro stanovení radionuklidů v případě vzniku radiační mimořádné události (RMU) v dnešní době roste. To klade zvýšené nároky na vývoj rychlejších postupů na předúpravu vzorků, mezi které patří také rozklad tavením. Automatická tavička Katanax byla na Státní ústav radiační ochrany pořízena z důvodu navýšení kapacity laboratoře a snahy o energetickou úsporu v porovnání s klasickou muflovou pecí. Hlavní výhodou automatické tavičky je rychlé zpracování až tří vzorků současně a jejich převedení do roztoku. Tím odpadá krok rozpouštění taveniny, který se provádí manuálně po vytažení a vychladnutí taveniny z pece a jedná se tak o značnou časovou a personální úsporu. Z literární rešerše o tavení

vzorku a jeho zpracování pro radiochemickou analýzu vyplývá, že typ tavidla se liší podle matrice vzorku. Pro alkalické vzorky je vhodné tavidlo tetraboritan lithný ($Li_2B_4O_7$), pro kyselé vzorky metaboritan lithný ($LiBO_2$). V případě neutrálních vzorků je použita směs těchto tavidel. Jako nesmáčivá přísada se používá boritan lithný (LiBr), který zlepšuje vylévání taveniny z kelímku. Cílem práce je optimalizace postupu tavení tj. poměr vzorku a tavidla, složení tavící směsi a teplotní průběh tavení pro různé matrice za účelem navýšení kapacity laboratoře a rychlého dodání výsledků analýz v případě RMU.

Tento příspěvek vznikl za podpory MV ČR.

1Po20
VPLYV ROZPÚŠŤADIEL A ICH ELIMINÁCIA V KVAPALINOVEJ CHROMATOGRAFII V SPOJENÍ S INFRAČERVENOU SPEKTROMETRIOU NA IDENTIFIKÁCIU LÁTOK

Denis Pavelek[1], Radoslav Halko[1]

[1]*Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra analytickej chémie, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15, Bratislava, Slovenská republika, pavelek7@uniba.sk*

Kombinácia kvapalinovej chromatografie a infračervenej spektrometrie sa vyznačuje vysokým stupňom chemickej špecifickosti, schopnosťou analyzovať kvalitatívne a kvantitatívne viaczložkové zmesi a dokáže analyzovať vzorky v nízkych rozsahoch medzných hodnôt detekcie. Infračervená spektrometria sa používa na identifikáciu jednotlivých zložiek zmesi po ich oddelení kvapalinovou chromatografiou [1].

Keď sa kvapalinová chromatografia kombinuje s infračervenou spektrometriou, hlavným problémom je, že zložky mobilnej fázy môžu skresliť infračervené spektrum analyzovanej zložky zmesi alebo vzorky. Na vyriešenie problému je možné použiť vhodné rozhranie. Na tento účel možno použiť buď prietokové bunky alebo off-line nepriame metódy merania, ako je prúd horúceho inertného plynu alebo ultrazvukový rozprašovač [1, 2].

Ovplyvňujúce parametre kombinácie kvapalinovej chromatografie a infračervenej spektrometrie zahŕňajú výber metódy eliminácie rozpúšťadla, výber techniky infračervenej spektrometrie a infračerveného pozadia na identifikáciu analytov vo vzorkách. Na identifikáciu analytov infračervenou spektrometriou má vplyv aj zloženie mobilnej fázy a použitie tlmivých roztokov, ktoré sa používajú v kvapalinovej chromatografii na separáciu zložiek zmesi. Okrem toho, mikroextrakcia kvapalina-kvapalina s použitím nepolárnych činidiel sa môže použiť na ošetrenie vzoriek pred analýzou kombináciou kvapalinovej chromatografie a infračervenej spektrometrie [2].

[1] G.W. Somsen, C.G., U.A.Th. Brinkman, Liquid chromatography–Fourier-transform infrared spectrometry. Journal of Chromatography A, 1999: p. 856.

[2] Pavelek, D., Využitie infračervenej spektrometrie na identifikáciu látok po ich separácii kvapalinovou chromatografiou. Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, 2021.

1Po21
NOVÝ PŘÍSTUP K OXIDACI LÉČIV

Lucie Pražáková[1], Jan Fischer[1], Anna Kubíčková[1]

[1]*Univerzita Karlova, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, Albertov 6, 128 00 Praha 2, prazakolu@natur.cuni.cz*

Oxidační degradace léčiv jsou součástí preklinických stabilitních tesů. Účelem stabilitních testů je podrobit léčivo nadměrné zátěži v podobě vysokého či nízkého pH, vysoké teploty, UV záření, kyselé a zásadité hydrolýze a právě zmiňované oxidaci [1]. Důležitým sledovaným faktorem je množství a druh vznikajících degradačních produktů. Běžně používaný způsob oxidace je pomocí peroxidu vodíku díky jehož působení léčivo zdegraduje v požadované míře v řádech hodin až dnů.

Cílem této studie je podrobit léčivo oxidačnímu vlivu, a v co nejkratším čase získat určené množství degradačních produktů. Díky působení elektrochemické oxidace je možné léčiva degradovat na požadovanou hodnotu v řádech několika minut [2, 3]. Použití elektrochemické oxidace má výhody v možnostech změny podmínek oxidace díky výběru elektrodového materiálu a vkládaného napětí na pracovní elektrodu. Vhodnou volbou oxidačních podmínek lze výrazně urychlit degradaci oproti chemické oxidaci, která je v tomto ohledu omezená.

V této studii byl porovnán vliv dvou elektrodových materiálů na oxidaci modelového léčiva. Jako pracovní elektroda byla pro degradaci použita platinová a borem dopovaná diamantová. Porovnání s klasickou oxidací pomocí peroxidu vodíu ukázalo, že výrazně účinnější degradace léčiva byla dosažena díky elektrochemickému působení. Vznikající dva hlavní degradační

produkty jsou shodné s produkty degradace za použití klasické chemické oxidace.

Poděkování: Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky (projekt č. 23-05688S) a Specifického vysokoškolského výzkumu na Univerzitě Karlově (SVV260690).

[1] Venkataraman S., Manasa M.: *Drug. Invent. Today. 10*, 137 (2018).
[2] Vymyslicky F., Krizek T., Kozlik P., Kubickova A., Hert J., Bartosinska E.: *J. Pharm. Biomed. Anal. 207*, 114341 (2022).
[3] Bartosinska E., Kozlik P., Kubickova A., Hert J., Fischer J., Krizek T.: *Talanta. 226*, 122141 (2021).

1Po22
RAPID DETERMINATION OF ^{226}Ra USING A MODIFIED SORBENT

Veronika Silliková[1], Jana Jakubčinová[2], Silvia Dulanská[3,4]

[1]*Institute of Inorganic Chemistry SAS, Dúbravská st., 9, 845 36 Bratislava, Slovakia, veronika.sillikova@savba.sk*
[2]*Department of Chemistry, Faculty of Natural Sciences and Informatics, Constantine the Philosopher University in Nitra, Tr. A. Hlinku 1, 949 01 Nitra, Slovakia*
[3]*Slovak Medical University, Limbová 12, 833 03 Bratislava, Slovakia*
[4]*Institute of Medical Physics, Biophysics, Informatics and Telemedicine, Faculty of Medicine, Comenius University in Bratislava, Sasinkova 2, 813 72 Bratislava, Slovakia*

The importance of mineral water in everyday life results from the presence of many valuable elements. Along with these elements, heavy and radioactive elements can be also observed and their interaction with the human body can lead to dangerous and unexpected diseases. In most countries, legal regulations are dealing with these problems [1]. $KMnO_4$ modified fly ash sorbent was used for rapid determination of ^{226}Ra in mineral water samples. The selected mineral water samples were pre-treated to remove CO_2 and 70 Bq·dm^{-3} of tracer radionuclide ^{133}Ba was added to the samples. Subsequently, the samples were eluted and prepared for alpha spectrometric measurement. Radium samples for alpha spectrometric measurement were prepared according to Maxwell's procedure [2]. The samples contained a different representation of minerals. Separation yields ranged from (90-99) %. After comparing volume activities with the limit values set by the Ministry of Health of the Slovak Republic in Decree 100/2018, Coll. [3], on limiting the exposure of residents from drinking water, natural mineral water and spring water, the values of volumetric activities obtained for individual mineral waters do not exceed the limits set by the ministry (drinking water 0.5 Bq·dm^{-3}; natural mineral water 1.90 Bq·dm^{-3}; spring water 0.6 Bq·dm^{-3}).

This publication was created thanks to support within the Operational Program Integrated Infrastructure for the project: Research and development in medical sciences - the way to personalized treatment of serious neurological, cardiovascular and cancer diseases 313011T431, co-financed from the resources of the European Regional Development Fund. This work was supported also by the Slovak Grant Agency under contract no. VEGA 2/0024/20.

[1] Chau ND., Tomaszewska B.: Grumezescu, A.M., Holban, A.M. Bottled and Packaged Water, Volume 4: The Science of Beverages. Woodhead Publishing. ISBN 978-0-12-815272-0 (2019).
[2] MAXWELL, SL III: *J. Radioanal. Nucl. Chem.* 270(3), 651 (2006).
[3] Decree no. 100/2018 Coll., of the Ministry of Health of the Slovak Republic on limiting exposure to residents from drinking water, natural mineral water and spring water.

1Po23
ELEKTROCHEMICKÁ DETEKCE INTERAKCE GALEKTÍNU A JEHO GLYKOMIMETIK

Marek Zelinka, Peter Šebest, Veronika Ostatná, Aleš Daňhel

Biofyzikální ústav, Akademie věd České republiky, v.v.i., Královopolská 135, 612 00 Brno, Česká republika, besta@ibp.cz

Galektiny jsou rodinou lektinů vázajících sacharidy (β-galaktosidy), které hrají klíčovou roli v různých biologických procesech, včetně buněčné adheze, signalizace, imunitní odpovědi a zánětu. Specifické rozpoznávání glykanů galektiny pomocí rozpoznávací sacharidové domény (CRD) je klíčové pro jejich funkční aktivity [1]. Typickými přirozenými ligandy pro galektin jsou oligosacharidy na povrchu buněk nebo extracelulární oligosacharidy obsahující β-D-galaktosu nebo N-acetyl-β-D-galaktosaminové jednotky. Patří mezi ně laktosa, N-acetyl-D-laktosamin, N,N'-diacetyl-D-laktosamin a jejich oligomerní a modifikované formy [2].

Při vývoji inhibitorů galektinů se většinou používají modifikované přírodní sacharidové ligandy (glykomimetika). Jejich design souvisí se strukturou vazebného žlábku galektinu, jehož

nejkonzervativnější část (tzv. podtypy C a D) je uzpůsobena pro interakci se dvěma monosacharidovými jednotkami současně [3].

Sacharidy jsou elektroinaktivní na rtuťových nebo uhlíkových elektrodách. Nicméně, v současnosti jsou syntetizované organokovové glykomimetika na bázi ferrocenu (Fc) a komplexů Ru, které mohou být díky přítomnosti kovu přímo detekované elektrochemickými metodami na rtuťových (Ru) nebo uhlíkových (Ru a Fc) elektrodách.

Elektrochemická detekce interakcí mezi galektinem a glykomimetikem má významný potenciál pro různé aplikace, včetně biosenzoriky, objevování léčiv i terapie. Nabízí příležitosti pro vývoj citlivých a selektivních elektrochemických biosenzorů pro detekci galektinů, jakož i screeningových platforem pro identifikaci nových glykomimetických ligandů s terapeutickým potenciálem.

Tato práce vznikla za finanční podpory Grantové agentury České republiky (projekt 23-06115S).

[1] L. Johannes, R. Jacob, H. Leffler, *J. Cell Sci.* 2018, *131*, jcs208884.
[2] D. Laaf, P. Bojarová, L. Elling, et al., *Trends Biotechnol.* 2019, *37*, 402–415.
[3] C. M. A. Guardia, D. F. Gauto, S. Di Lella, et al., *J. Chem. Inf. Model.* 2011, *51*, 1918–1930.

1Po24
RÁDIOFARMAKA S OBSAHOM JÓDU – VYUŽITIE RÁDIOANALYTICKÝCH METÓD PRI ICH KONTROLE KVALITY

Darina Tóthová[1], Tomáš Cincula[1], Michal Galamboš[1]

[1]*Katedra jadrovej chémie, Prírodovedecká fakulta Univerzita Komenského v Bratislave, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, darina.tothova@uniba.sk*

Rádiofarmaká sú špeciálne liečivá, ktoré vo svojej štruktúre obsahujú rádioaktívny izotop. Jód má jediný stabilný izotop a to ^{127}I. Rádioaktívne izotopy jódu používané v nukleárnej medicíne sú ^{123}I, ^{124}I, ^{125}I a ^{131}I. Každý z nich má špecifické fyzikálne vlastnosti ako doba polpremeny, druh premeny ktorej podlieha, energiu gamma, ktorú emituje. Tieto vlastnosti určujú možnosti použitia daného rádioizotopu [1].

Cieľový rádionuklid jódu dokážeme pripraviť dvoma spôsobmi: produkciou v jadrovom reaktore alebo v časticovom urýchľovači.

Jód prítomný v rádiofamaku, ktoré je určené pre terapiu alebo diagnostiku musí prejsť prísnou kontrolou kvality. Kontrolou kvality rozumieme určenie kvalitatívnych i kvantitatívnych vlastností vyrobeného produktu, ktorý musí spĺňať špecifikácie určené európskym liekopisom až potom sa stáva rádiofarmakom pre humánne použitie [2].

Na stanovenie čistoty produktu rádiochemickej syntézy sa využívajú separačné metódy - HPLC a TLC doplnené rádiometrickou detekciou [3]. Pre stanovenie jódu a nečistoty jodičnanu sme použili metódu HPLC, ktorú sme optimalizovali a validovali pre použitie na oddelení kontroly rádiofarmák.

Táto publikácia vznikla vďaka podpore v rámci Operačného programu Integrovaná infraštruktúra pre projekt Zvýšenie kapacít a kompetencií Univerzity Komenského vo výskume, vývoji a inováciách, ITMS2014+: 313021BUZ3, spolu–financovaný zo zdrojov Európskeho fondu regionálneho rozvoja.

EURÓPSKA ÚNIA
Európsky fond regionálneho rozvoja
OP Integrovaná infraštruktúra 2014 – 2020

[1] Cris G., Moldovean-Cioroianu N.S., Timaru D.-G., Andries G., Cainap C., Chis V.: Int. J. Mol. Sci. 23, 5023 (2022).
[2] IAEA. Diagnostic radiopharmaceuticals, https://www.iaea.org/topics/diagnostic-radiopharmaceuticals.
[3] Žuvela P., Skoczylas M., Jay Liu J., Bączek T., Kaliszan R., Wong M. W., Buszewski B.: Chemical Reviews. doi:10.1021/acs.chemrev.8b00246 (2019).

1Po25
ÚPRAVA VZORKY SMOLKY PRE ĽUDSKÝ BIOMONITORING METABOLITOV PLASTIFIKÁTORA DINCH

Lucia Vráblová[1], Renáta Górová[1], Helena Jurdáková[1]

[1]*Katedra analytickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Ilkovičova 6, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, vrablova58@uniba.sk*

Environmentálne zdravie je veľmi aktuálnou témou, s ktorou súvisí aj snaha o minimalizovanie ľudskej expozície škodlivým látkam z prostredia. Európsky program pre ľudský biomonitoring (HBM4EU) identifikoval plastifikátory ako látky prioritného záujmu. V posledných rokoch rástli obavy týkajúce sa používania ftalátov, ktoré sa bežne využívali ako plastifikátory na zmäkčovanie plastových materiálov. Nakoľko bol zistený ich nepriaznivý účinok na zdravie, dochádza od roku

2002 k nahrádzaniu ftalátov DEHP (di(2-etylhexyl)ftalát) a DINP (diizononylftalát). Toxikologické testy ukázali, že vhodnou bezpečnejšou alternatívou je plastifikátor Hexamoll® DINCH (diizononylester kyseliny cyklohexán-1,2-dikarboxylovej). Expozícia DINCH sa hodnotí na základe sledovania jeho oxidovaných metabolitov (MINCH, cx-MINCH, oxo-MINCH a OH-MINCH). Štandardne testovanou matricou pre stanovenie daných metabolitov je moč, avšak pre zhodnotenie prenatálnej expozície je najvhodnejšou matricou smolka (mekónium). Mekónium je prvá stolica novorodenca čiernozelenej farby bez zápachu a jej výhodou je neinvazívny odber. Keďže ide o pomerne zložitú matricu, pred samotnou analýzou je často nutné použiť niekoľko predúpravných techník. V našej práci sa zaoberáme optimalizáciou procesu úpravy výberom vhodných rozpúšťadiel pre kvapalinovú extrakciu vzoriek mekónia. Na analýzu vzoriek je využitá metóda vysokoúčinnej kvapalinovej chromatografie s tandemovou hmotnostnou spektrometriou (HPLC-MS/MS). Z výsledkov vyplýva, že najvhodnejším extrakčným činidlom je etylacetát:hexán v pomere 25:75, kedy boli dosiahnuté najvyššie hodnoty celkovej efektivity analytického postupu.

Práca bola podporená Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy APVV-20-0462.

1Po26
ALDO-KETO REDUCTASE 1C3 AS A NOVEL OFF-TARGET FOR THE BRUTON′S TYROSINE KINASE INHIBITOR TIRABRUTINIB

Eva Novotná[1], Lucie Čermáková[1], Lenka Laštovičková[1], Vladimír Wsól[1]

[1]*Charles University, Faculty of Pharmacy in Hradec Kralove, Department of Biochemical Sciences, Hradec Kralove, 500 05, Czech Republic, wsol@faf.cuni.cz*

Tirabrutinib is a small-molecule inhibitor of Bruton´s tyrosine kinase (BTKi) currently investigated in clinical trials for the treatment of different B-cell malignancies. In Japan, tirabrutinib has been approved to treat recurrent or refractory primary central nervous system lymphoma (PCNSL). Together with ibrutinib, tirabrutinib belongs to the effective drugs in the management of this diffuse large B-cell lymphoma subtype. Recent studies show that BTKis can enhance the cytotoxicity of anthracyclines and may improve the outcome of anthracycline-based chemotherapy, including that used to treat PCNSL. However, the exact mechanism of this interaction remains to be elucidated.

To determine whether tirabrutinib can increase the efficacy of anthracyclines by inhibiting their reductive metabolism, we screened its activity against recombinant anthracycline reductases AKR1A1, 1B1, 1B10, 1C3, and CBR1. The enzymes were expressed in E. coli. His-tagged proteins were purified using immobilized metal affinity chromatography. The results obtained with recombinant proteins were verified in experiments with transiently transfected cancer cells. UHPLC was used to detect the anthracycline metabolite daunorubicinol.

Tirabrutinib inhibits AKR1C3, the enzyme that converts doxorubicin and daunorubicin to their less active alcohol metabolites. In our experiments, tirabrutinib decreased the activity of recombinant AKR1C3 and was also effective at the level of intact cells.

This work was supported by the project InoMed (no. CZ.02.1.01/0.0/0.0/18_069/ 0010046) co-funded by the European Union and by the Grant Agency of Charles University (project no. 315221 and SVV 260 550).

1Po27
2D MXENE COMPOSITES BASED INTERFACES FOR ULTRASENSITIVE CANCER BIOMARKERS NANOBIOSENSING

Lenka Lorencová[1], Veronika Pinková Gajdošová[1], Štefánia Hrončeková[1], Juvissan Aguedo[1], Tomáš Bertók[1], Peter Kasák[2], Ján Tkáč[1]

[1]*Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 5807/9, 845 38 Bratislava, Slovak Republic, Lenka.Lorencova@savba.sk*
[2]*Center for Advanced Materials, Qatar University, P.O. Box 2713, Doha, Qatar*

MXene nanomaterials, two-dimensional layered carbides and nitrides, offering benefits as ease of processing, relatively high yields and large flakes, hydrophilicity, metal-like electrical conductivity, rich functional groups and unique optical properties have a profound effect on the entire field of material science. Furthermore MXene $Ti_3C_2T_x$ with redox active centers proved as an excellent electrochemical catalyst in e.g. oxygen reduction reaction, electrochemical reduction of H_2O_2, detection of small redox molecules, as we established in our previous studies. In recent years an immense increase in a number of affinity-based biosensors employing MXene interfaces has been observed considering that the suitable patterning

approaches of MXene for subsequent immobilization of biomolecules are crucial.

Cancer diseases present an enormous problem with 19.3 million new cancer cases and 10.0 million cancer-associated deaths worldwide in 2020 and the number of deaths will increase by 47% by 2040. Thus, there is high demand for ultrasensitive and selective sensing platforms able to detect cancer biomarkers down to very low levels.

In this effort we patterned glassy carbon electrode/MXene $Ti_3C_2T_x$ interface with a mixed zwitterionic carboxy and sulfobetaine layer by electrochemical trigger for a covalent immobilisation of anti-CA15-3 antibody as a bioreceptive probe for detection of a breast cancer biomarker. CA 15-3, a candidate breast cancer biomarker of 290-400 kDa, occurs normally at level of 3-30 U/mL in serum. The designed immunosensor was able to detect glycoprotein-based CA 15-3 biomarker in a clinically relevant concentration window of up to 50 U mL^{-1}. Moreover we confirmed, that $Ru(NH_3)_6Cl_3$ redox probe has a potential to be applied for better understanding of interfacial properties onto the proteins modifying electrode surfaces [1].

Sarcosine, N-methylglycine, presents an intermediate metabolite involved in glycine synthesis and degradation. The correlation between changed sarcosine levels and prostate cancer was referred in a number of studies. Since significantly elevated levels of sarcosine can be present in urine (from 20 nM to 5 µM), urine is the biofluid of choice while the analysis of biomarkers in urine is even considered noninvasive. We designed amperometric miniaturised portable enzymatic nanobiosensor for the ultrasensitive analysis of sarcosine. Disposable screen-printed carbon electrodes (SPCE) together with MXene $Ti_3C_2T_x$@chitosan composite and sarcosine oxidase provided a reliable, sensitive and quick detection nanoplatform. A satisfactory LOD value of 10.4 nM was achieved by applying SOx/MXene@chitosan/SPCE biosensor during measurement in a drop of 100 µL. The as-fabricated biosensor had shown a good stability within a period of at least 5 weeks after its preparation [2].

Moreover large surface area of 2D nanomaterials is applicable for selective enrichment of biomolecules such as glycoproteins (cancer biomarkers) or glycans (complex carbohydrates). We utilised an efficient MXene-cartridge-based columns for specific cancer-associated sialylated and bisecting *N*-glycans enrichment from complex serum samples [3].

The authors would like to acknowledge for the financial support from APVV-17-0300, APVV-22-0345 and APVV-20-0272. This work was supported by Qatar University grant QUCG-CAM-22/23-504.

[1] Pinkova Gajdosova V., Lorencova L., Kasak P., Jerigova M., Velic D., Orovcik L., Barath M., Farkas P., Tkac J.: *Anal. Chim. Acta 1227*, 340310 (2022).

[2] Hroncekova S., Lorencova L., Bertok T., Hires M., Jane E., Bučko M., Kasak P., Tkac, J.: *J. Funct. Biomater. 14*, 161 (2023).

[3] Aguedo J., Pakanova Z., Lorencova L., Nemcovic M., Kasak P., Barath M., Farkas P., Tkac J.: *Anal. Chim. Acta 1234*, 340512 (2022).

POSTERY - SEKCIA 2
FYZIKÁLNA CHÉMIA

2Po01
POVRCHOVÉ AKTIVITY PRÍRODNÝCH DERIVÁTOV KYSELINY OLEÁNOVEJ

Martin Bajcura[1], Miloš Lukáč[1], Martin Pisárčik[1]

[1]*Katedra chemickej teórie liečiv, Farmaceutická fakulta, Univerzita Komenského, Kalinčiakova 8, 832 32 Bratislava, Bajcura1@uniba.sk*

Triterpénové saponíny izolované z rastlín *Primula elatior*, *Primula veris* a *Hedera helix* vykazujú rozmanité zaujímavé biologické a fyzikálno-chemické vlastnosti. Tieto sekundárne metabolity nachádzajúce sa v spomenutých rastlinách z čeľade Primulaceae a Araliaceae vykazujú antifungálne, cytotoxické, antibakteriálne, antiproliferatívne a antiprotozoálne účinky [1]. Triterpénové saponíny s oleánovým aglykónovým skeletom boli extrahované zo sušenej drogy Primulae radix a Hederae folium za pomoci ultrazvuku v metanole. Purifikácia izolovaných triterpénových saponínov bola uskutočnená za pomoci série reverzno-fázových chromatografií. Ako stacionárne fázy boli použité Diaion HP20, MCI gel CHP20P a RPC18. Štruktúra zlúčenín bola charakterizovaná pomocou ^{1}H a ^{13}C nukleárnej magnetickej rezonančnej spektroskopie, ktorej výsledky boli porovnané so zápisom v literatúre. Meraním závislosti povrchového napätia od koncentrácie vo vodnom roztoku bola stanovená hodnota kritickej micelárnej koncentrácie (cmc) monodezmozidového primulasaponínu 1, primakrosaponínu a α-hederínu a bidezmozidového hederasponínu B a hederakozidu C. Porovnaním hodnôt cmc vykazoval hederakozid C najvyššiu hodnotu cmc = $3{,}10\times10^{-4} \pm 6\times10^{-6}$ mol.dm^{-3}. 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}). Primulasaponín 1 vykazoval najnižšiu hodnotu tejto veličiny A_{cmc} = 0,7 ± 0,03 nm^2. Oleánové triterpénové saponíny boli taktiež podrobené meraniu veľkosti častíc pomocou dynamického rozptylu svetla.

Táto práca vznikla za podpory grantov UK/204/2023 a VEGA 1/0686/21.

[1] Francis G, Kerem Z, Makkar HPS, Becker K, The biological action of saponins in animal systems: a review. *Br J Nutr* 88:587–605, (2002).

2Po02
DSC STUDY OF THERMOOXIDATIVE STABILITY OF LIGNOSULFONATE-FILLED RUBBER COMPOUNDS

Zuzana Cibulková[1], Tibor Dubaj[1], Peter Šimon[1]

[1]*Oddelenie fyzikálnej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, STU Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, zuzana.cibulkova@stuba.sk*

In this work, the thermooxidative stability of lignosulfonate-filled rubber compounds based on nitrile-butadiene rubber (NBR) and styrene-butadiene rubber (SBR) is studied using non-isothermal DSC measurements. The effect of different concentrations of lignosulfonate filler on the stability of both matrices is investigated. Moreover, in the case of SBR the effect of two different curing systems is also studied. For the treatment of the experimental results, a method for the evaluation of the kinetic parameters describing the temperature dependence of the induction periods of thermal oxidation based on non-Arrhenian temperature function, was employed [1]. The kinetic parameters enabled to calculate the values of induction periods as a function of temperature. Subsequently, protection factors and antioxidative effectiveness [2] of lignosulfonate filler and curing system on the stability of rubber matrices were evaluated. It is shown that stabilizing effect of lignosulfonate depends on the rubber matrix. Calcium lignosulfonate exhibit only weak stabilizing effect in NBR and SBR; better effects have been obtained for NBR. The use of peroxide curing system leads to destabilization of lignosulfonate-filled SBR compounds.

Financial support from the Scientific Grant Agency of the Slovak Republic (VEGA 1/0498/22) is acknowledged.

[1] Šimon P., Hynek D., Malíková M., Cibulková Z.: *J Therm Anal Calorim*. *93*,817 (2008).
[2] Cibulková Z., Šimon P., Lehocký P., Balko J.: *Polym Degrad Stabil*. *87*, 479 (2005).

2Po03
NANODIAMONDS WITH THERMORESPONSIVE POLYMERS FOR INTRACELLULAR THERMOMETRY

Jakub Copak[1], Michal Gulka[1], Ema Fialova[1], Maabur Sow[2], Raúl B. Gonzalez[2], Simon Lepleux[2], Fedor Jelezko[2], Petr Cigler[1]

[1]*Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, of the CAS, Flemingovo nam. 2, Prague, Czechia,* jakub.copak@uochb.cas.cz
[2]Institute of Quantum Optics, Ulm University, Ulm 89081, Germany

Real-time monitoring temperature inside living cells is fundamental for understanding their biological activities, yet it still remains challenging. Promising candidates for such thermometry are nanodiamonds (NDs) containing nitrogen-vacancy (NV) centres. These biocompatible particles can be internalized into cells and the NV optical signal can be used for highly localized quantum sensing. The temperature-dependent zero-field splitting of the NV energy levels allows for direct temperature readout, but its sensitivity is limited [1].

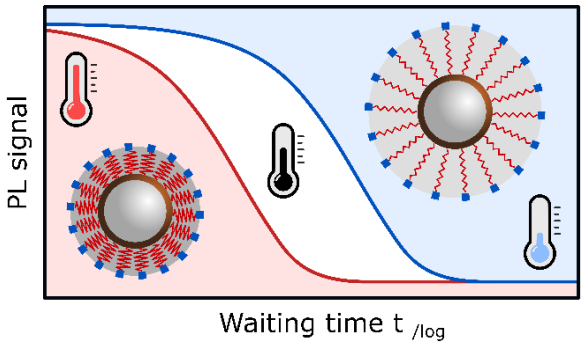


Figure 1 Schematic of sensor principle.

We develop a ND-based thermometry approach utilizing the T_1 relaxation time of the NV electronic spin. The presence and proximity of paramagnetic species strongly influences the length of NV T_1 relaxation time [2]. In order to translate temperature changes into a detectable signal, we use a thermoresponsive polymer terminally modified with Gd^{3+}-chelates covalently attached to the surface of the ND [3]. The sensing mechanism is based on the temperature-dependent reversible shrinking/expansion of the polymer, which displaces the Gd^{3+} ions from the proximity of the ND and, affects the NV T_1 relaxation (see Figure 1). Moreover, the polymer responsiveness can be fine-tuned by its composition to the temperature range of interest, enhancing the sensitivity of the sensor.

[1] Petrini G. et al.: *Advanced Science.* 2202014, 9 (2022).
[2] Barton J. et al.: *ACS Nano.* 12938–12950, 14 (2020).
[3] Chen C.-Y., Chen C.-T.: *Chem. Commun*. 994–996, 47 (2011).

2Po04
CONFORMATIONAL ANALYSIS OF THE TAU SEQUENCE 214SER-THR231 BY COMBINED MM AND QM METHODS

Michal Hricovíni[1], Ondrej Cehlár[2], Rostislav Škrabana[2], Miloš Hricovíni[1]

[1]*Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, 845 38 Bratislava, Slovakia, Milos.Hricovini@savba.sk*
[2]*Institute of Neuroimmunology, Slovak Academy of Sciences, 84510 Bratislava, Slovakia*

Alzheimer's disease, the most prominent neurodegenerative disorder, is characterized by the accumulation of intrinsically disordered protein tau in the form of potentially toxic aggregates that form pathological lesions in the brain tissue, as intracellular neurofibrillary tangles. To unravel the conformational properties of microtubule-binding tau sequence 214Ser-Thr231, the monoclonal antibody Tau5 with an epitope in this region was used as a surrogate tau protein binding partner and the structure of the complex was solved (PDB ID 4TQE). Apart from application of surface plasmon resonance (SPR) spectroscopy to characterise the tau-Fab interaction, the conformation in the free-state was investigated using theoretical chemistry methods, such as quantum mechanics and molecular dynamics.

In this contribution we present a theoretical analysis of the tau sequence 214Ser-Thr231. The calculations were performed in two steps. First, a conformational search was done by molecular mechanics (MMFF94) in the gas phase as well as in aqueous environment (GBSA model with different internal dielectric constants: ε = 1, 2, 4 and 5.78) and revealed 17 energy minima in solution. These minima were further optimised by DFT using the MN15/6-31+G(d) approach, resulting in a reduction to a total of 4 minima in solution that are different from the minimum present in the gas phase. Refinement of these structures requires further calculations using higher level basis sets.

This work was financially supported by Slovak grant agency APVV-21-0479 and VEGA 2/0071/22.

2Po05
REZONANČNE ZOSILNENÉ THz-FWM VO FLUORIDOCH

Eva Noskovičová[1,2], Monika Jerigová[1,2], Vojtech Szocs[1], Dušan Velič[1,2], Katarína Koťuhová[2], Dušan Lorenc[1]

[1] International Laser Centre, Ilkovicova 3, 84104 Bratislava, dusan.lorenc@gmail.com
[2]Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Ilkovicova 6, Bratislava

Nebezpečné priemyselné chemické látky (TIC, TIM) zohrávajú významnú úlohu z environ–mentálneho aj bezpečnostného hľadiska. Jednou z oblastí intenzívneho výskumu je použitie THz spektroskopických techník pri identifikácii látok typu TIC/TIM v plynnej fáze. Štorvlnové zmiešavanie (FWM) v chi(3) médiách ponúka možnosť konverzie THz signálu do optickej oblasti. V rámci prebiehajúcej štúdie bolo vyšetrované THz-FWM v CaF_2, BaF_2 a MgF_2 a vo všetkých prípadoch bolo zistené rezonančné zosilnenie výstupného optického signálu.

Predkladaná metóda má význam v THz senzorike.

Táto práca vznikla s podporou grantu NATO SPS G5795.

2Po06
VOLUME PROPERTIES OF THE MOLTEN SYSTEMS MF ─ K_2ZRF_6 (MF = LiF; NaF AND KF)

Jarmila Mlynáriková[1], Miroslav Boča[1], Blanka Kubíková[1]

[1]Institute of Inorganic Chemistry SAS, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, Slovak Republic, jarmila.mlynarikova@savba.sk

Density is one of the most important thermodynamic properties of liquids. From the density data volume properties can be calculated and volumetric studies are of considerable value in investigation of the structure of liquids. Based on the experimentally measured data of density (determined by the Archimedean method) of the melts systems (MF ─ K_2ZrF_6 (MF = LiF, NaF and KF) molar volumes, partial molar volumes and the excess molar volumes were calculated. The partial molar volumes of K_2ZrF_6 were obtained by using two different approaches - simple polynomial regression analysis and multicomponent polynomial regression in the form of the Redlich-Kister equation. Based on excess partial molar volumes of compounds (so called parameter of compressibility) we have discussed the volume contraction/expansion. Volume contraction was identified in all three binary systems based on negative values of excess molar volumes.

This work was supported by the Slovak Grant Agency VEGA 2/0024/20 and VEGA 2/0046/22.

2Po07
3D TLAČENÝ THZ FOTONICKÝ PRIETOKOVÝ SENZOR PRE DETEKCIU NEBEZPEČNÝCH PLYNOV

Eva Noskovičová[1,2], Monika Jerigová[1,2], Vojtech Szöcs[2], Dušan Velič[1,2], Justína Nováková[2], Simon Fleming[3], Alessandro Tuniz[3], Dušan Lorenc[1]

[1]Centrum vedecko-technických informácií SR, Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičová 3, 84104, Bratislava, Slovensko, noskovic.eva@gmail.com
[2]Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského v Bratislave, Ilkovičová 6, 84215, Bratislava, Slovensko,
[3]The University of Sydney, NSW 2006, Australia

Prietokový senzor s terahertzovým fotonickým kryštálom [1] vytlačeným 3D tlačou je možné použiť v terahertzovej spektroskopii na detegovanie nebezpečných plynov. V terahertzovej spektrálnej oblasti môžeme väčšine plynov priradiť charakteristické rotačné prechody. V senzore bola použitá fotonická štruktúra, ktorá efektívne lokalizuje terahertzové pole a jeho steny boli uspôsobené pre účinný prietok plynu. Senzor sme testovali na amoniak pomocou terehartzovej spektroskopie v časovej doméne THz-TDS v rozsahu od 0.5 do 4 THz. V plynnom amoniaku boli detegované píky pri 1.2; 1.8; 2.4; 3 a 3.6 THz, ktoré sú typické pre jeho rotačnú štruktúru.

Práca vznikla za podpory grantu NATO SPS G5795.

[1] Stefani A., Kuhlmey B.T., Digweed J., Davies B., Ding Z., Zreiqat H. Mirkhalaf M. and Tuniz A.: *ACS Photonics* 9, 6 (2022).

2Po08
STANOVENIE ÚČINNÉHO PRIEREZU DVOJFOTÓNOVEJ ABSORPCIE METÓDOU Z-SCAN

Dominik Sarvaš[1], Eva Noskovičová[1,2], Dušan Lorenc[1,2]

[1]Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského, Ilkovičova 6,845 12 Bratislava, sarvas6@uniba.sk
[2]Medzinárodné laserové centrum CVTI, Ilkovičova 3, 841 03 Bratislava

V súčasnosti je štúdiu nelineárnych optických javov venované značné úsilie, nielen v teoretickej, ale hlavne v aplikačnej rovine. Ukazuje sa, že

materiály vykazujúce tieto vlastnosti majú široký potenciál použitia v mnohých oblastiach, od solárnych článkov vo vylepšení ich efektivity, až po medicínu v liečení rôznych ochorení.

V práci sa zameriavame na štúdium dvojfótonovej absorpcie prostredníctvom metódy *Z*-scanu. Jej výhodou, oproti iným technikám, je pomerne jednoduché oddelenie kľúčového javu dvojfotónovej absorpcie od ostatných nelineárno-optických javov napr. nelineárnej refrakcie. Použiteľnosť metódy *Z*-scanu na štúdium dvojfotónovej absorbpcie a určenie účinného prierezu σ^{TPA} sa overovala pre roztok Rhodamínu B v MeOH, keďže jeho nelineárno-optické vlastnosti sú v literatúre dobre popísané [1]. Ultimatívnym cieľom práce je použitie tejto techniky na určenie účinného prierezu novosyntetizovaných organických molekúl vykazujúcich podľa predbežných meraní veľmi vysoké hodnoty σ^{TPA}.

Táto práca vznikla s podporou grantu NATO SPS G5795.

[1] Rallabandi Sailaja, Prem B. Bisht, C.P. Singh, K.S. Bindra, S.M. Oak: *Optics Communications. 277*, 433 (2007).

2Po09
KINETIC COMPENSATION EFFECT IN SIMPLE AND COMPLEX PROCESSES

Peter Šimon[1], Tibor Dubaj[1], Zuzana Cibulková[1]

[1]*Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia, peter.simon@stuba.sk*

In the theory of elementary reactions, the kinetic compensation effect is an umbrella term for the observed linear relationship between: (i) the logarithm of the preexponential factors and the activation energies, (ii) enthalpies and entropies of activation, or (iii) between the enthalpy and entropy changes of a series of similar reactions. The origin of the compensation effect resides in the possibility of expressing the Gibbs energy of activation as various combinations of the enthalpy and entropy of activation [1]. The theory of elementary reactions can be applied also for complex processes where the reaction rate is governed by a single elementary step. The elementary reactions and the complex processes with a single rate-limiting elementary step are called the simple processes. Mechanisms of processes in condensed state are very often unknown or too complicated to be characterised by a simple kinetic model since they tend to occur in multiple elementary steps with different rates. In this case, the theory of the activat ed complex is inapplicable. For the description of the kinetics of such complex processes, the methods based on the general rate equation (GRE) are often used. It will be demonstrated that both, the activation energy and preexponential factor in GRE depend on temperature. The compensation effect in the form of linear relationship between the logarithm of the preexponential factor and the activation energy is always observed for the complex processes. It will be demonstrated that, among other origins, the kinetic compensation effect is the consequence of treating GRE as a kinetic equation of a simple process [2].

The financial supports from the Slovak Scientific Grant Agency, grant No. VEGA 1/0498/22, and from the Agency for Research and Development, grant No. APVV-15-0124, are greatly acknowledged.

[1]https://en.wikipedia.org/wiki/Enthalpy%E2%80%93entropy_compensation. Last access 14 July 2023.
[2] Šimon P., Dubaj T., Cibulková Z.: *J. Therm. Anal. Calorim.*, submitted.

2Po10
EFFECT OF Cu(II) ON THE BIOCHEMICAL PROPERTIES OF SELECTED POLYPHENOLS: THEORY vs. EXPERIMENT

Miriama Šimunková[1], Marek Štekláč[1,2], Michal Malček[1], Martin Kemény[3], Renáta Raptová[1], Marián Valko[1]

[1]*Department of Physical Chemistry, Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics, Faculty of Chemical and Food Technology, STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, miriama.simunkova@stuba.sk*
[2]*Slovak National Supercomputing Centre, Dúbravska cesta 9, 845 35 Bratislava*
[3]*Institute of Electronics and Photonics, Faculty of Electrical Engineering, STU, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava*

Polyphenolic compounds (PPs) are molecules containing two or more -OH groups in their structure. Due to DNA-intercalating ability, metal complexes of PPs can act as therapeutics in the treatment of human diseases, e.g. cancer. Since wide group of PPs, flavonoids, possess metal-chelating properties they can serve in prevention of neurodegeneration [1, 2]. Binding to metal ion, *e.g.*, Cu(II), may affect activity of various

flavonoids. In presented work, antioxidant and DNA-intercalating properties of Cu(II)-flavonoid complexes are investigated using spectroscopic, electrochemical and computational studies. The formation of Cu(II)-PP complexes of selected flavonoids with varying structures was studied by UV-Vis spectroscopy and electrochemistry. Job's plot methods showed molar ratio of Cu(II)-PP interaction. DFT calculations indicate that Cu(II) ion adopts square planar coordination. Radical scavenging activity of PPs in the presence/absence of Cu(II) ion was monitored using $ABTS^{\bullet+}$ assay showing significant impact of Cu(II) on antioxidant properties of parent PP molecule. Decreased inhibition of $ABTS^{\bullet+}$ was found in the presence of glutathione. The calculated DI values suggest that the formation of Cu(II) complex leads to a weakening of O-H bonds. Thermodynamical study imply that the calculated BDE values have well-defined trends [3]. CT-DNA binding constants were obtained by UV-VIS absorption titrations. The molecular docking studies demonstrate that the formation of Cu(II)-PP complexes improves the DNA-intercalating ability of the parent PP.

This contribution was supported by projects: APVV-19-0087, VEGA-1/0482/20 and STU Grants for Excellent Team of Young Researchers – FLAVDOK.

[1] Jomová K. et al.: *Molecules. 24,* 1 (2019).
[2] Poprac P. et al.: *Trend Pharmacol. Sci. 32,* 592 (2017).
[3] Šimunková M. et al.: *J. Mol. Liquids 359,* 1 (2022).

2Po11
EXPLORING A4B1 INTEGRIN-POLYPEPTIDIC LIGAND INTERACTIONS THROUGH IN SILICO METHODS

Stanislav Kozmon[1,2], Barbora Stratilová[1]

[1]*Institute of Chemistry Slovak Academy of Sciences, Dúbravska cesta 5807/9, 845 38 Bratislava, Slovakia*
[2]*Medical Vision o. z., Záhradnícka 4837/55, 821 08 Bratislava, Slovakia*

The α4β1 integrin belongs to the α4 integrin family, a group of transmembrane receptors that facilitate cell adhesion and signaling. Given its pivotal role in diverse pathological processes such as cancer progression, metastasis, autoimmune disorders, and inflammation, the α4β integrin has garnered substantial attention in the realm of pharmaceutical research. An extensive search across databases including Chemspace, MolPort, and ZINC20 was conducted to identify ligands with the potential to bind to the active site akin to the RGD peptide. These candidate ligands were subjected to molecular docking within the binding site of the α4β1 integrin headpiece. Subsequently, complexes featuring the most promising ligands were subjected to evaluation through molecular dynamics simulations. This involved an examination of interactions and calculations of binding free energy. The collected data revealed that among the chosen ligands, six exhibit binding free energy levels comparable to that of the RGD peptide and two ligands demonstrated significantly lower binding free energy, underscoring their potential as compelling candidates for further exploration.

This research is the result of the project implementation CEMBAM – Center for Medical Bioadditive Research and Manufacturing, ITMS2014+: 313011V358 supported by the Operational Programme Integrated Infrastructure funded by the European Regional Development Fund, and also supported by APVV project APVV 21 0346.

2Po12
TRIEDENIE HMOTNOSTNÝCH SPEKTIER UHLÍKATÝCH CHONDRITOV PODĽA STUPŇA PREMENY POMOCOU PCA

Justína Nováková[1,3], Vojtech Szöcs[1], Dušan Lorenc[1], Monika Jerigová[1,4], Martin Baláž[2]

[1]*Centrum vedecko-technických informácií Slovenskej republiky (CVTI SR), Lamačská cesta 7315/8A, 811 04 Bratislava*
[2]*Institut für Astrophysik, Universität Wien, Türkenschanzstraße 17 (Sternwarte), 1180 Wien*
[3]*Regionálny úrad verejného zdravotníctva Bratislava hl. mesto so sídlom v Bratislave, Ružinovská 4813/8, 821 01 Bratislava*
[4]*Katedra Fyzikálnej a Teoretickej chémie, Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského, Ilkovičova 6, 841 04 Bratislava*

Uhlíkaté chondrity sú triedou meteoritov, ktorá sa vyznačuje predovšetkým najmenej zmeneným zložením od dôb svojho vzniku. Preto sú uhlíkaté chondrity nositeľmi informácii o vzniku Slnečnej sústavy, kedy boli vytvorené. Delia sa na niekoľko skupín, podľa pôvodu, petrografického stupňa, alebo aj chemického či minerálového zloženia. Zväčša sú však rozdiely medzi jednotlivými skupinami také malé, že korektné zaradenie novej vzorky do niektorej zo skupín musí byť podporené viacerými nezávislými publikáciami. Dobrým ukazateľom petrografickej premeny vodou je minerál phylosilikát [1, 2], ktorého vznik v horninách je viazaný na prítomnosť vody. Pomocou hmotnostnej spektrometrie

sekundárnych iónov je možné tento minerál v spektrách meteoritov charakterizovať, a pomocou matematickej metódy analýzy hlavných komponent tieto meteority spoľahlivo roztriediť do zodpovedajúcich skupín petrografickej premeny.

POSTERY - SEKCIA 3 ANORGANICKÁ A MATERIÁLOVÁ CHÉMIA

3Po01 PŘÍPRAVA A VYUŽITÍ KOMPOZITNÍCH SORBENTŮ Z ELEKTRÁRENSKÝCH POPÍLKŮ K ČIŠTĚNÍ ODPADNÍCH VOD

Barbora Doušová[1], Eva Bedrnová[1], Miloslav Lhotka[1], Lukáš Pilař[1], David Koloušek[1]

[1]*Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, ČR, dousovab@vscht.cz*

Stále se zvyšující produkce průmyslových aktivit vyžaduje nové metody využívání odpadních a recyklovatelných surovin v environmentálních technologiích. Perspektivními materiály jsou směsné sorbenty, které za vhodných podmínek nabízejí širší selektivitu vůči sorbovaným částicím a vysokou sorpční účinnost.

Mezi hojně využívanými přírodními sorbenty dominují aluminosilikáty, které vynikají vhodnými vlastnostmi, příznivou cenou a šetrností k prostředí. Dalšími zajímavými materiály mohou být i elektrárenské a teplárenské popílky, a také pyrolýzní a odpadní bioprodukty [1].

Kompozitní sorbenty byly připraveny jako směsi aluminosilikátů (bentonit z Kadaně, západní Čechy a klinoptilolit z Nižného Hrabovce, východní Slovensko) s popílky lišícími se typem paliva a teplotou spalování (popílek z biomasy – Komořany, uhelné popílky – teplárna Plzeň a elektrárna Vřesová). Sorpční vlastnosti byly testovány na sorpci toxických kationtů (Cd^{2+}, Cs^{+}) a oxoaniontů (AsO_4^{3-}, CrO_4^{2-}) z modelových roztoků o koncentraci 0.5 mmol.l^{-1}.

Sorbovatelnost kationtů na kompozity se zvýšila oproti čistým aluminosilikátům o 10 až 60 %, u aniontů došlo k nárůstu o 15 až 30 % [2, 3]. Kompozity s bentonitem se jevily jako účinnější sorbenty kationtů i aniontů, z testovaných popílků prokázal nejlepší výsledky popílek z biomasy, který vzniká spalováním při nižších teplotách a specifický povrch S_{BET} popílku z biomasy >> S_{BET} popílku z uhlí.

Práce vznikla za podpory projektu ABTOMAT2022 (Využití alternativních primárních a druhotných surovin pro výrobu hliníku, hliníkových sloučenin, dalších kovů a produktů) č. TH79020001.

[1] Jambhulkar H.P., Shaikh S.M.S., Kumar M.S.: *Chemosphere*. 213, 333 (2018).
[2] Doušová B., Lhotka M., Grygar T., Machovič V., Herzogová L.: *Applied Clay Science*. 54, 166(2011).
[3] Dousova B. ,Machovic V., Lhotka M., Reiterman P., Bedrnová E.: *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects* 650, 129650 (2022).

3Po02 SURFACE OPTIMIZATION OF NANODIAMONDS USING NON-THERMAL PLASMA

Michal Gulka[1], Priyadharshini Balasubramanian[2], Ekaterina Shagieva[3], Josef Khun[4], Vladimir Scholtz[4], Fedor Jelezko[2], Stepan Stehlik[3], Petr Cigler[1]

[1]*Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, of the CAS, Flemingovo nam. 2, Prague, Czechia, gulka.michal@gmail.com*
[2]*Institute of Quantum Optics, Ulm University, Ulm 89081, Germany*
[3]*Institute of Physics of the Czech Academy of Sciences, Cukrovarnická 10, 162 00 Prague 6, Czechia*
[4]*Department of Physics and Measurements, University of Chemistry and Technology in Prague, Czechia*

Possibility of local sensitive monitoring of intracellular processes using quantum sensing with nitrogen-vacancy (NV) centers in nanodiamonds (NDs), would greatly advance cell biology and would enable numerous medical applications. Although such probes have been studied extensively [1], they are still limited in sensitivity. Whereas the NV center in bulk diamond holds record room-temperature electron spin coherence time among solid-state qubits, NVs in NDs exhibit much poorer relaxation times. As suggested in [2], prolongation of the NVs relaxation time should be possible by ND surface optimization creating mixed H/O termination.

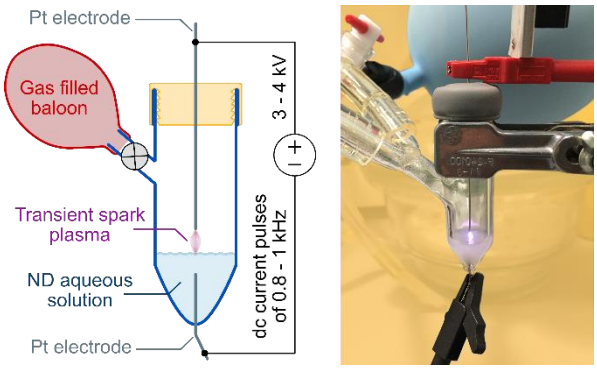


Fig. 1: Non-thermal plasma system for ND modifications.

Here we employ a non-thermal plasma (NTP) [3] with the aim of prolongation of the NV electron spin relaxation times (Figure 1). We have used various diamond samples (HPHT/detonation, H-/O-terminated surface) and ambient gases (air, O_2, He, and H). The NTP modification induces changes in C=O bonds, restructuration of C-H bonds, and differences in OH termination. Using hydrogen as the ambient gas results in the biggest changes in FTIR spectra. For HPHT NDs the zeta potential dropped from an initial ~ -40 mV to ~ -50 mV. Both T_1 and T_2 NV electron relaxation times improved significantly after the modification.

[1] T. Zhang *et al.*, *ACS Sens.* 6, 2077–2107 (2021).
[2] M. Kaviani *et al.*, *Nano Lett.* 14, 4772–4777 (2014).
[3] J. Khun *et al.*, *Plasma Sources Sci. Technol.* 27, 065002 (2018).

3Po03
VPLYV TEPLOTY SPEKANIA NA PEVNOSŤ V OHYBE HYDROXYAPATITOVEJ KERAMIKY PRIPRAVENEJ 3D TLAČOU

Zora Hajdúchová[1], Sára Jurašková[1], Marián Janek[1,2]

[1]*Oddelenie anorganických materiálov, FCHPT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, zora.hajduchova@stuba.sk*
[2]*Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, PriF UK, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava*

3D tlač alebo aditívna výroba, je automatizovaný proces výroby trojrozmerných objektov pomocou CAD (počítačom podporovaný dizajn). Pre výrobu keramických materiálov existuje viacero technológií, ktoré sa využívajú pri 3D tlači. Najlacnejšou a ľahko dostupnou možnosťou je FDC (Fused Deposition of Ceramics), kde sa keramický prášok zmiešava s termoplastickým polymérom, následne sa vytláča do strún, ktoré sú použité v FDM (Fused Deposition Modeling) tlačiarňach. Za nevýhodu tejto technológie možno považovať rýchlosť tlače a minimálne rozlíšenie vrstiev na úrovni 0,1 µm. Na získanie keramického materiálu je potrebné následné odstránenie spojiva a spekanie.

Testované telieska boli vytlačené z kompozitnej struny, ktorá pozostávala z hydroxyapatitu a z polyvinylalkoholu v hmotnostnom pomere 1:1. Na tlačenie teliesok sa použila komerčne dostupná 3D tlačiareň (Leapfrog Creatr), s tryskami o priemere 0,4 mm a teplotou tlače 215 °C. Rozmery teliesok boli zvolené tak, aby spĺňali parametre potrebné pre meranie trojbodového ohybu podľa normy STN EN ISO 6872. Telieska boli následne spekané použitím dynamického režimu spekania do teplôt 1200 °C, 1300 °C a 1400 °C. Medzi sledované parametre patrili objemová hmotnosť, pórovitosť a pevnosť v ohybe.

Z výsledkov vyplýva, že vhodná teplota spekania týchto materiálov sa nachádza v intervale 1200 – 1300 °C.

Táto práca vznikla s podporou projektov: grant VEGA 1/0342/21, VEGA 1/0070/22, APVV-21-0173, APVV-16-0341, PP- COVID-20-0025 a Projektu operačného programu integrovaná infraštruktúra projektu: "Advancing University Capacity and Competence in Research, Development and Innovation" (ACCORD) ITMS2014+: 313021X329, spolufinancovaného zo zdrojov Európskeho Fondu regionálneho rozvoja.

3Po04
CHANGES OF CLASS G CEMENT PASTE INDUCED BY THE COMBINED EFFECT OF GEOTHERMAL WATER AND HIGH TEMPERATURE

Eva Kuzielová[1], Zora Hajdúchová[1], Matúš Žemlička[2], Jiří Másilko[3], Oľga Fričová[4]

[1]*Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, zora.hajduchova@stuba.sk*
[2]*Institute of Construction and Architecture, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 03 Bratislava*
[3]*Materials Research Centre, Faculty of Chemistry, Brno University of Technology, Purkyňova 118, 612 00 Brno*
[4]*Faculty of Electrical Engineering and Informatics, Technical University of Košice, Letná 9, 042 00 Košice*

The present study compares changes of class G cement paste induced by geothermal solution with those of water, both under the simultaneous action of high temperature. The following conditions simulating Ďurkov geothermal wells [1] were used: water to binder ratio = 0.44; 150 °C; 18 MPa; geothermal water of sodium-chloride type. After 7

days of hydrothermal curing, samples were analyzed using TGA, XRD, ^{29}Si and ^{27}Al NMR.

Contrary to the sample hydrated in water, cement paste left to hydrate in the geothermal water demonstrated the higher relative intensity of the resonance peaks attributed to Q^2 and Q^1 sites together with the lower intensity of the peak associated with hydrated monomeric silica tetrahedra. Improved thermal stability may be explained by promoted hydration and resulting more polymerized structure as was confirmed also by previous results [2]. Besides Al (IV) signal confirming the substitution of Si by Al in C-S-H phases, the presence of aluminum in octahedral (Al (VI)) coordination was observed. The absence of corresponding phases in XRD patterns points out their amorphous character. Low-intensity resonance from penta-coordinated Al can originate from Al^{3+} substituting for Ca^{2+} in the C-S-H interlayer or defect site in the interlayer of the C-S-H structure [3].

This work was supported by the courtesy of APVV-19-0490, Slovak Grant Agency VEGA No. 2/0032/21, and the Operational Program Integrated infrastructure for the project: Advancing University Capacity and Competence in Research, Development and Innovation ("ACCORD") ITMS2014 +: 313021X329, co-financed by resources of the European Regional Development Fund.

[1] Fričovský B., Vizi L., Fordin´al K., Surový M., Marcin D.: Proceedings, 44th Workshop on Geothermal Reservoir Engineering. Stanford University, Stanford, CA, USA, 1 (2019).
[2] Kuzielová E., Tatarko M., Slaný M., Žemlička M., Másilko J., Novotný R., Palou MT.: *Geothermics*, 108, 102632 (2023).
[3] Andersen M.D., Jakobsen H.J., Skibsted J.: *Cement Concrete Res*. 36(1), 3 (2006).

3Po05
COMPARISON OF GEOTHERMAL WATER AND SODIUM CHLORIDE SOLUTION ACTION ON CEMENT PASTES UNDER AMBIENT CONDITIONS

Eva Kuzielová[1], Zora Hajdúchová[1], Kristína Compeľová[1], Michal Slaný[2], Vladimír Pavlík[3]

[1]*Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, zora.hajduchova@stuba.sk*
[2]*Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 03 Bratislava*
[3]*Faculty of Civil Engineering, Slovak University of Technology, Radlinského, Radlinského 11, 810 05 Bratislava*

The differences between geothermal water of sodium-chloride type and NaCl solution action on cement pastes were studied for up to 90 days. An initial concentration of Na^+ and Cl^- ions in both solutions was equal. Pastes were prepared from Portland cement Class G and cement substituted by 30 mass% of silica fume and metakaolin in two different ratios. Referential and multicomponent pastes were prepared using a water-to-binder ratio equal to 0.44. In the case of the composite samples, plasticizer Stachement® 903 was applied. One day after preparation, samples were de-molded, immersed in solutions, and let to hydrate under atmospheric conditions. Changes were studied by TGA, FTIR, and SEM.

In comparison with samples hydrated in water, significant calcium leaching led to a decrease in portlandite amount and in blended pastes together with pozzolanic reactions to its total depletion. Hydrated monosulfoaluminate present in the water-cured samples was not detected in the samples submitted to solutions. Instead, mass losses attributed to the presence of Friedel's salt appeared in the surface parts of samples. Carbonation seems to be promoted by the presence of chlorides. Regardless of the paste composition, more significant changes occurred in the NaCl solution not enriched in other ions.

This work was supported by the courtesy of Slovak Grant Agency VEGA No. 2/0032/21, and the Operational Program Integrated infrastructure for the project: Advancing University Capacity and Competence in Research, Development and Innovation ("ACCORD") ITMS2014+: 313021X329, co-financed by resources of the European Regional Development Fund.

3Po06
KOMPLEXY Zr(IV) S DERIVÁTMI 8-HYDROXYCHINOLÍNU A ICH CYTOSTATICKÁ AKTIVITA

Michaela Harmošová[1], Mária Vilková[1], Martin Kello[2], Dominika Šebová[2], Erika Samoľová[3], Miroslava Litecká[4], Ivan Potočňák[1]

[1]*Ústav chemických vied, PF UPJŠ, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovenská republika, michaela.krescankova@student.upjs.sk*
[2]*Ústav farmakológie LF UPJŠ, Trieda SNP 1, 040 11 Košice, Slovenská republika*
[3]*Fyzikálny ústav AV ČR, Na Slovance 2, 182 21 Praha, Česká republika*
[4]*Ústav anorganickej chémie AV ČR, Husinec-Řež č.p. 1001, 250 68 Řež, Česká republika*

Bolo pripravených sedem jednojadrových komplexov zirkónia (IV), $[Zr(8\text{-}HQ)_4]\cdot DMF\cdot H_2O$ (**1**), $[Zr(dClQ)_4]\cdot EtOH$ (**2**), $[Zr(ClNQ)_4]\cdot EtOH$ (**3a**), $[Zr(ClNQ)_4]\cdot DMF$ (**3b**), $[Zr(BrQ)_4]$ (**4**), $[Zr(dBrQ)_4]\cdot DME$ (**5**), $[Zr(2\text{-}MedBrQ)_4]\cdot 2DMF$ (**6**), a dva dvojjadrové, $[Zr_2Cl_2(CQ)_4\mu_2\text{-}O(DMF)_2]\cdot 0{,}33DMF$ (**7**), $[Zr_2Cl_2(ClBrQ)_4\mu_2\text{-}O(DMF)_2]\cdot DMF$ (**8**) (DME = 1,2-dimetoxyetán, H8-HQ = 8-hydroxychinolín, HdClQ = 5,7-dichlór-8-hydroxychinolín, HClNQ = 5-chlór-7-nitro-8-hydroxychinolín, HBrQ = 7-bróm-8-hydroxychinolín, H2-MedBrQ = 2-metyl-5,7-dibróm-8-hydroxychinolín, HCQ = 5-chlór-7-jód-8-hydroxychinolín, HClBrQ = 5-chlór-7-bróm-8-hydroxychinolín). Komplexy boli charakte–rizované elementárnou analýzou, mono–kryštálovou RTG štruktúrnou analýzou a IČ spektroskopiou. Jednojadrové komplexy **1**-**6** majú centrálny atóm Zr(IV) oktakoordinovaný štyrmi bidentátnymi chinolínovými ligandmi. Okrem komplexu **4** obsahujú všetky komplexy mimo koordinačnej sféry aj molekuly solvátov, ktoré sa zapájajú do vodíkových väzieb a následne stabilizujú štruktúru komplexov. Dvojjadrové komplexy **7** a **8** majú vo svojej štruktúre dva atómy Zr(IV) koordinované dvoma bidentátnymi chinolínmi, jedným DMF a jedným chlorido ligandom. Siedme koordinačné miesto je obsadené atómom kyslíka, ktorý premosťuje oba centrálne atómy Zr(IV). Stabilita komplexov rozpustných v DMSO bola overená NMR spektroskopiou. *In vitro* cytotoxické vlastnosti komplexov **1**, **2**, **4**, **5** a **6** a príslušných ligandov boli študované voči 8 rakovinovým bunkovým líniám a ich selektivita bola overená na BJ-5ta nerakovinovej bunkovej línii. Najúčinnejšie komplexy sú **1** a **4**, ktorých hodnoty IC_{50} sú v rozsahu 5,7-29,0 a 27,7-61,5 μM na všetkých testovaných líniách (okrem HeLa).

Táto práca vznikla za podpory VEGA 1/0126/23, VVGS-PF-2022-2134 a VVGS-2022-2182.

3Po07
ZKOUMÁNÍ ADAPTACE BAKTERIÍ NA ANTIMIKROBIÁLNÍ ÚČINKY NANOČÁSTIC STŘÍBRA

Lucie Hochvaldova[1], Renáta Večeřová[2], Milan Kolář[1], Libor Kvítek[1], Aleš Panáček[1]

[1]*Katedra fyzikální chemie, Univerzita Palackého Olomouc, Přírodovědecká fakulta, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, Česká Republika, lucie.hochvaldova@upol.cz*
[2]*Ústav mikrobiologie, Univerzita Palackého Olomouc, Lékařská fakulta, Hněvotínská 5, 775 15 Olomouc, Česká republika*

V současné době představuje nárůst počtu bakteriálních infekcí vyvolaných bakteriemi rezistentními vůči běžně využívaným antibiotikům velký terapeutický problém. Pokud bude vznik a šíření bakteriální rezistence narůstat stejnou rychlostí jako doposud, tak se mohou tyto obtížně léčitelné infekce v budoucnu celosvětově stát jednou z nejčastějších příčin úmrtí. Do té doby je tedy zapotřebí přijít s novými alternativami antimikrobiálních látek, či s novými léčebnými postupy, které by pokud možno na bakteriální buňku působily jiným mechanismem, než dosavadní terapeutika a nebyly tak náchylné ke vzniku bakteriální rezistence. Jednou z možných alternativních antimikrobiálních látek jsou nanočástice stříbra, které při nízkých koncentracích, jež nejsou toxické pro savčí buňky, efektivně usmrcují bakterie. Díky neustálým změnám bakteriálního genomu a jejich schopnosti přizpůsobit se negativním podmínkám je však zřejmé, že bakterie budou schopny čelit i těmto antibakteriálním účinkům. Několik nedávno publikovaných prací potvrdilo, že jsou si bakterie schopny vyvinout rezistenci vůči účinkům nanočástic stříbra díky malým genomovým změnám [1] a v některých případech pouze fenotypovou adaptací [2], bez nutnosti změny genetické informace. V rámci tohoto výzkumu byl zkoumán vývoj bakteriální rezistence po opakovaném vystavování bakterií sub-inhibičním koncentracím stříbra jak u Gram-negativní, tak u Gram-pozitivní bakterie. Získané informace nám pomohou pochopit mechanismy rezistence a nastínit další přístupy v boji vůči bakteriální rezistenci.

Autoři za finanční podporu děkují projektu NU20-05-00165 programu na podporu zdravotnického aplikovaného výzkumu na léta 2020 – 2026

financovaném Ministerstvem zdravotnictví České republiky.

[1] Gunawan, C., Teoh, W. Y., Marquis, C. P. & Amal, R. Induced Adaptation of Bacillus sp. to Antimicrobial Nanosilver. *Small* 9, 3554–3560 (2013).
[2] Panacek, A. et al. Bacterial resistance to silver nanoparticles and how to overcome it. *Nat. Nanotechnol*. 13, 65–71 (2018).

3Po08
BIOLOGICKY AKTÍVNE PALÁDNATÉ KOMPLEXY ZLOŽENIA $NH_2(CH_3)_2[PdCl_2(XQ)]$

Martina Kepeňová[1], Michaela Benediková[1], Miroslava Litecká[2], Ivan Potočňák[1]

[1]Ústav chemických vied, PF UPJŠ v Košiciach, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovenská republika, martina.kepenova@student.upjs.sk
[2]Ústav anorganickej chémie AV ČR, Husinec-Řež 1001, 250 68, Řež, Česká republika

Deriváty 8-hydroxychinolínu (HXQ) ponúkajú široké spektrum biologických vlastností, v rámci ktorých za spomenutie určite stoja ich antibakteriálne, antifungálne, antivirálne a protirakovinové aktivity [1]. Koordináciou na centrálne atómy, kedy tieto organické molekuly vystupujú prevažne ako bidentátne chelátové ligandy, bolo pozorované zvýšenie študovaných aktivít [2].

Za účelom prípravy paládnatých komplexov bola pripravená štvorica komerčne nedostupných derivátov 8-hydroxychinolínu: 5-nitro-7-jód-8-hydroxychinolín (HNIQ), 5-nitro-7-bróm-8-hydroxychinolín (HNBrQ), 5-jód-7-bróm-8-hydroxychinolín (HIBrQ) a 5-chlór-7-bróm-8-hydroxychinolín (HClBrQ) a charakterizovaná infračervenou a NMR spektroskopiou, a elementárnou a RTG štruktúrnou analýzou (HIBrQ, HClBrQ).

Novo syntetizované komplexy zloženia $NH_2(CH_3)_2[PdCl_2(XQ)]$, kde XQ = NIQ (**1**), NBrQ (**2**), IBrQ (**3**) a ClBrQ (**4**) boli charakterizované infračervenou spektroskopiou, elementárnou a RTG štruktúrnou analýzou. Stabilita zlúčenín bola študovaná v roztoku DMSO a DMSO/voda (1:1) po dobu troch dní. Pripravené komplexy kryštalizujú ako štvorcovoplanárne komplexné anióny, v rámci ktorých dochádza ku koordinácii jednej molekuly ligandu XQ prostredníctvom atómov kyslíka a dusíka a dvoch atómov chlóru, ktoré sú usporiadané v *cis* polohe, záporný náboj aniónu kompenzuje nekoordinovaná molekula dimetylamónneho katiónu. Štruktúry pripravených komplexov sú stabilizované vodíkovými väzbami (**1**, **2**, **3**, **4**) a π-π interakciami (**4**).

Táto práca vznikla za podpory grantov VEGA 1/0126/23 a VVGS-2022-2182.

[1] Gupta R.: *Bioorg. Chem. 108*, 104633 (2021).
[2] Zhou, X.: *J. Inorg. Biochem. 238*, 112051 (2023).

3Po09
VLIV RYCHLOSTI OHŘEVU PŘI PYROLÝZE NA MEZOPOROZITU SOFT-TEMPLÁTOVANÝCH GELŮ

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

Ostravská univerzita, Přírodovědecká fakulta, Katedra chemie, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava, eva.kinnertova@osu.cz

Porozita uhlíkatých materiálů může být ovlivněna několika parametry. Cílem tohoto příspěvku bylo prozkoumat vliv rychlosti ohřevu na porozitu uhlíkatých materiálů připravených pyrolýzou resorcinol-formaldehydových gelů obsahujících Pluronik F-127 jako templát. Byl zkoumán také vliv velikosti částic.

Experimenty byly provedeny pomocí termického analyzátoru (STA 449 C, Jupiter, Netzsch) v inertní atmosféře dusíku (100 ml/min), s rychlostí ohřevu 1 – 20 K/min a velikostí částic od jemného prášku po částice větší než 2 mm. Porozita byla charakterizována pomocí termoporometrie a adsorpce dusíku.

Výsledky ukázaly, že s rostoucí rychlostí ohřevu se zvětšovala velikost mezopórů od jednotek až po desítky nanometrů a současně se zvyšoval i výtěžek uhlíku. Při nízkých rychlostech ohřevu probíhá rozklad templátu a proces karbonizace dostatečně pomalu na to, aby se plynné produkty průběžně uvolňovaly do okolní atmosféry, což vede k rozvoji porozity odpovídající velikosti soft-templátovaných micel. Naproti tomu při vyšších rychlostech ohřevu vede rychlý vývin plynu a omezení difúze uvnitř částic ke vzniku větších mezopórů. Vliv velikosti částic se ukázal jako nevýznamný, zejména při nižších rychlostech ohřevu.

Pochopení vztahu mezi rychlostí ohřevu, velikostí částic a mezopozitou je zásadní pro optimalizaci procesu pyrolýzy a přípravu uhlíkatých materiálů se specifickou porozitou.

Tento příspěvek vznikl za podpory projektu SGS12/PřF/2023 (Ostravská univerzita).

3Po10
PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE NANOSTRUKTUROVANÝCH POVRCHŮ ROUBOVANÝCH ČÁSTICEMI PRO ANTIBAKTERIÁLNÍ VLASTNOSTI

Zdeňka Kolská[1], Simona Kamínková[1], Václav Švorčík[2]

[1]CENAB, PřF, Univerzita J. E. Purkyně v Ústí nad Labem, Pasteurova 15, 40096 Ústí nad Labem, zdenka.kolska@ujep.cz
[2]ÚIPL, FCHT, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 3, 16628 Praha

V rámci této práce byly připraveny nanostrukturované povrchy různých polymerních folií pro antibakteriální vlastnosti. Povrchy polymerů byly nejprve aktivovány a následně roubovány chemickými sloučeninami a následně částicemi síry s cílem buď připravit antimikrobiální povrchy [1].

Byly studovány: (i) různé polymerní folie s rozdílnou polaritou, (ii) různé metody aktivace povrchů substrátů, fyzikální (plazma, UV záření, laserová ablace), a různé podmínky (vlnové délky, doby aktivace, …); (iii) různé metody syntézy částic síry; (iv) různá činidla pro stabilizaci částic; (v) různá činidla pro roubování připravených částic na aktivované a chemicky modifikované povrchy polymerů.

Povrchové vlastnosti byly charakterizovány dostupnými technikami: XPS, goniometricky, elektrokinetickou analýzou; goniometricky pro studium smáčivosti; AFM a SEM pro zjištění změn drsnosti a morfologie povrchu, velikosti klastrů částic naroubovaných na povrchu substrátu; stanovení velikosti povrchu a porozity materiálů; DLS analýzou byly studovány velikosti a zeta potenciál testovaných částic. Následně byly provedeny antimikrobiální testy.

Všechny použité techniky prokázaly (i) úspěšnou aktivaci povrchů polymerů, (ii) následné chemické roubování povrchů materiálů, (iii) imobilizaci testovaných částic síry, (iv) antibakteriální chování některých testovaných povrchů.

Tato práce vznikla za podpory projektu Grantové agentury Ministerstva zdravotnictví ČR č. NU20-08-00208.

[1] Lupínková S, Kaimlová M, Kormunda M, Kolská Z.: *Surf. Interface Anal. 53*, 108 (2021).

3Po11
VYUŽITÍ MIKROVLNNÉHO ZÁŘENÍ PŘI PŘÍPRAVĚ UHLÍKATÝCH XEROGELŮ

Lucie Kořená[1], Václav Slovák[1], Ana Arenillas[2], Samantha Lizette Flores López[2]

[1]Ostravská univerzita, Katedra chemie, 30. dubna 22, Ostrava 70103, lucie.korena@osu.cz
[2]Instituto Nacional del Carbón, CSIC, Apartado 73, 33080 Oviedo, Španělsko

Porézním uhlíkatým xerogelům se v současné době věnuje značná pozornost, mohou totiž měnit své porézní vlastnosti v závislosti na podmínkách přípravy tak, aby vyhovovaly požadavkům zamýšlené aplikace. Díky tomu se tyto materiály považují za vysoce perspektivní pro celou řadu aplikací od skladování energie, přes katalýzu až po adsorpci. Avšak konkurenceschopnost porézních uhlíkatých xerogelů významně limituje časová a finanční náročnost jejich přípravy. Využití mikrovlnného záření při jejich přípravě, které vede k zefektivnění celého procesu, se tak jeví jako vhodné řešení. S pomocí mikrovlnného záření mohou být připraveny uhlíkaté xerogely lišící se jak porozitou (mikroporézní, mikro-mezoporézní a mikro-makroporézní [1, 2], nebo také mikro-mezo-makroporézní), tak výsledným tvarem (kuličky [3], válečky). Konkrétní možnosti příprav na příkladu resorcinol-formaldehydových gelů budou představeny v rámci tohoto příspěvku.

Obr. 1 Resorcinol-formaldehydové organické gely

Tato práce vznikla za podpory projektu SGS12/PřF/2023.

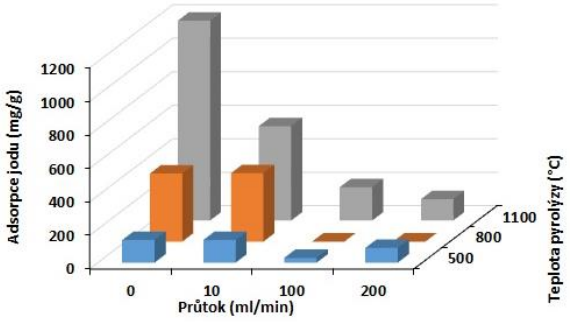
[1] N. Rey-Raap, A. Arenillas, J.A. Menéndez, Microporous And Mesoporous Materials 223 (2016) 89-93.
[2] E.G. Calvo, E.J. Juárez-Pérez, J.A. Menéndez, A. Arenillas, Journal of Colloid and Interface Science 357 (2011) 541-547.
[3] J.A. Menéndez, E.J. Juárez-Pérez, E. Ruisánchez, E.G. Calvo, A. Arenillas, Carbon 50 (2012) 3555-3560.

3Po12
VLIV RYCHLOSTI PRŮTOKU ATMOSFÉRY PŘI PYROLÝZE ORGANICKÝCH LÁTEK NA POROZITU VZNIKAJÍCÍCH UHLÍKATÝCH MATERIÁLŮ

Samuel Kowalczyk, Václav Slovák

Ostravská univerzita, Katedra chemie, 30. dubna 22, Ostrava 70103, themimoweicz@gmail.com

Cílem práce bylo prozkoumat vliv rychlosti průtoku inertní atmosféry (dusík) při pyrolýze organických látek na povrchové vlastnosti vznikajících uhlíků. Vzorky biomasy (dřevěné piliny, káva), čistá celulóza a připravený resorcinol-formaldehydový gel byly pyrolyzovány za pomoci termické analýzy (teplota pyrolýzy 500, 800 a 1100 °C; rychlost průtoku dusíku 0, 10, 100 a 200 ml/min) a v laboratorní trubkové peci (teplota pyrolýzy 900 °C; rychlost průtoku 20 a 200 ml/min). Povrchové vlastnosti připravených uhlíků byly charakterizovány adsorpcí jodu.



Obr. 1 Vliv rychlosti průtoku dusíku a teploty pyrolýzy na povrchové vlastnosti (vyjádřené jako adsorpce jodu) uhlíku připraveného pyrolýzou dřevěných pilin.

Bylo zjištěno, že rychlost průtoku inertní atmosféry (dusík) výrazně ovlivňuje povrchové vlastnosti a tento efekt narůstá s rostoucí teplotou. Obr. 1 ilustruje tento efekt na příkladu pyrolýzy dřevěných pilin.

Snížení rychlosti průtoku mělo za následek zvýšení adsorpce jodu. Tento efekt byl charakteristický pro většinu vzorků při teplotách nad 800 °C. K největším změnám docházelo při snížení průtoku ze 100 na 10 ml/min.

Naměřené výsledky z termické analýzy pro teplotu (800 °C a 1100 °C) se svým trendem shodují s výsledky z trubkové pece (900 °C) a ukazují na to, že je ekonomicky výhodné využít menší rychlost průtoku inertní atmosféry pro přípravu vzorků s lepší porozitou.

Tato práce vznikla za podpory projektu SGS12/PřF/2023 Ostravské univerzity.

3Po13
THE PHASE EQUILIBRIA OF Na_3AlF_6–NdF_3 AND $(Na_3AlF_6–NdF_3)_{EUT}$–Nd_2O_3 SYSTEM

Dhiya Krishnan[1], Michal Korenko[1,2,3], František Šimko[1,2], Blanka Kubíková[1]

[1]*Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, Slovakia, uachdiya@savba.sk*
[2]*Centre of Excellence for Advanced Materials Application – CEMEA, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 5807/9, 845 11 Bratislava, Slovakia*
[3]*Loire Valley Institute for Advanced Studies, 1 rue Dupanloup, 45000 Orléans, France*

Electrowinning is the dominating industrial method for rare earth metal extraction from their oxides in the salt extraction process [1]. Molten salts provide a unique working environment. They offer an ionic, nonaqueous habitat wherein various metal oxides may be dissolved. This also applies to neodymium. It is industrially produced by high temperature electrolysis of Nd_2O_3 dissolved in molten LiF–NdF_3 electrolyte with oxide concentration in the molten fluoride electrolyte to be around 2 wt. % (0.96 mol %) and the operational temperature between 1050–1100 °C [2, 3]. The very low solubility of the neodymium oxide in the molten electrolyte is an obvious disadvantage of the current industrial electrolysis. It has a direct impact on the low current efficiency of the process.

Therefore, the phase equilibria of Na_3AlF_6–NdF_3 and $(Na_3AlF_6–NdF_3)_{eut}$–Nd_2O_3 systems have been analyzed by thermal analysis and for the first time, to our knowledge, presented. Both investigated mixtures seem to form a simple eutectic system. It can be concluded that the solubility of Nd_2O_3 in the molten eutectic system of Na_3AlF_6–NdF_3 is relatively high compared to the solubility of Nd_2O_3 in the current molten industrial electrolyte (2 wt. %) for the electrowinning of neodymium.

This study was financially supported by the Slovak grant agencies APVV–19–0270, APVV–19–0461, VEGA 2/0024/20, and VEGA 2/0046/22. The work was performed within the ITMS project (with code 313021T081) supported by Research & Innovation Operational Programme funded by the ERDF.

[1] Abbasalizadeh A, Seetharaman S, Teng L, Sridhar S, Grinder O, Izumi Y, Barati M: *JOM* 65, 1552 (2013).
[2] Grjotheim K, Kvande H, Qingfeng L, Zhuxian Q: *Metal production by molten salt electrolysis: especially Aluminium and Magnesium*, China University of Mining and Technology Press, Xuzhou (1998).
[3] Krishnamurty N and Gupta C. K. *Extractive*

Metallurgy of Rare Earth, 2nd. Ed., CRC Press, Boca Raton (2016).

3Po14
MEĎNATÉ KOMPLEXY DERIVÁTOV KUMARÍNU AKO POTENCIONÁLNE PROTIRAKOVINOVÉ ČINIDLÁ

Jakub Kurjan[1], Mária Vilková[1], Miroslava Litecká[2], Ivan Potočňák[1]

[1]*Ústav chemických vied, PF UPJŠ v Košiciach, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovenská republika, jakub.kurjan@student.upjs.sk*
[2]*Ústav anorganickej chémie AV ČR, Husinec-Řež č.p. 1001, 250 68 Řež, Česká republika*

Od začatia klinického používania cisplatiny ubehlo už 45 rokov. Úspech liečby rakoviny cisplatinou je limitovaný jej vedľajšími účinkami a získanou rezistenciou rakovinových buniek [1]. Intenzívne rozvíjanou oblasťou výskumu pre farmaceutické použitie sa preto stali komplexy iných prechodných kovov. Meď je prítomná v mnohých enzýmoch a zohráva úlohu v angiogenéze nádorových buniek. Intracelulárna koncentrácia medi je vyššia v rakovinových bunkách ako zdravých, čo naznačuje, že rakovinové bunky by mohli efektívne absorbovať komplexy medi [2]. Kumarín a jeho deriváty vykázali viacero biologických vlastností, jednou z nich je aj protirakovinová aktivita [3].

V našej práci sa preto venujeme príprave komplexov medi s derivátmi 4-hydroxykumarínu ako potencionálne biologicky aktívnych látok. Organickou syntézou bol pripravený ligand 3-(1-(2-pyridylamino)etylidén)-2H-chromén-2,4-dión (HL) a následne aj jeho fluór-, chlór- a brómderiváty v polohe 6 na kumarínovom jadre (6XHL). Tieto ligandy boli použité pri syntéze komplexov medi, pričom celkovo bolo pripravených 5 nových komplexov medi (1 s ligandom HL a 4 s ligandami 6XHL). Všetky komplexy a ligandy boli charakterizované základnými fyzikálno-chemickými metódami (IČ a NMR spektroskopia, CHN elementárna analýza). Pre ligand HL a všetky meďnaté komplexy bola vyriešená ich kryštálová štruktúra.

Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA 1/0126/23.

[1] Peng K., et al.: *Coordination Chemistry Reviews.* 449, 201240 (2021).
[2] Lowndes S.A., et al.: *J. Mammary Gland Biol. 10*, 299-310 (2005).
[3] Lu W. et al.: *J. Inorg. Biochem*. 238, 112030 (2023).

3Po15
NEAR-INFRARED PHOTOLUMINESCENT GOLD NANOCLUSTERS

Klaudia Kvaková[1,2], Goutam Pramanik[1,3], Ondřej Pavelka[4], Jan Valenta[4], Petr Cígler[1]

[1]*Institute of Organic Chemistry and Biochemistry of the Czech Academy of Sciences, Flemingovo náměstí 542/2, 160 00, Praha 6, Czech Republic, klaudia.kvakova@uochb.cas.cz*
[2]*Charles University, First Faculty of Medicine, Kateřinská 1660/32, 121 08 Prague 2*
[3]*(present address) UGC DAE, Consortium for Scientific Research, Kolkata Centre, Sector II, LB-8, Bidhan Nagar Kolkata 700106, West Bengal, India*
[4]*Department of Chemical Physics and Optics, Faculty of Mathematics and Physics, Charles University, Ke Karlovu 3, 121 16, Prague, Czechia*

Photoluminescent (PL) gold nanoclusters (AuNCs) exhibit remarkable optical characteristics such as high photostability, long emission lifetimes, tunable emission maxima, and significant Stokes shift. Our studies focus on the synthesis, modifications, and applications of AuNCs as bioimaging probes, nanosensors, or optoelectronic devices. First, a straightforward synthetic method was developed to prepare water-soluble, biocompatible, and colloidally stable PL AuNCs emitting in the near-infrared region. Our findings indicate that AuNCs have potential in biomedical and cellular imaging applications [1]. Additionally, surface modifications of the AuNCs can be used to tune their properties. In our work, iodine modification of AuNCs was studied. We show that the iodine atoms present in the ligands increase the fluorescence decay lifetime of the AuNCs, which contrasts with the heavy-atom effect described on common fluorophores. This finding is beneficial for bioimaging using the AuNCs [2]. One of the AuNCs' limitations can be a relatively small quantum yield. A common strategy to boost the performance of weaker fluorophores is plasmonic enhancement. Therefore we tried to improve AuNCs' PL properties by coupling them with gold nanorods (AuNRs). The most significant enhancement of PL intensity occurs when the excitation wavelength matches AuNRs' strong longitudinal plasmonic band and the distance between AuNCs and AuNRs is 5 nm which is also a relevant result for further AuNCs' applications [3].

[1] Pramanik G.: *J. Vis. Exp.* 157, 60388 (2020).
[2] Pramanik G.: *Nanoscale*. 23, 13 (2021).
[3] Pavelka O.: *Nanoscale.* 14, 3166 (2022).

3Po16
URČENÍ TEXTURNÍCH CHARAKTERISTIK JÍLOVÝCH MINERÁLŮ

Miloslav Lhotka[1], Barbora Doušova[1]

[1]*VŠCHT Praha, Ústav anorganické technologie, Technická 5, 166 28 Praha 6-Dejvice, Miloslav.Lhotka@vscht.cz*

Porézní látky se vyskytují v mnoha oblastech chemické technologie, nejčastěji jako katalyzátory, membrány, adsorbenty. Jílové minerály lze také považovat za porézní materiály, a proto je znalost texturních vlastností jednou z důležitých charakteristik těchto materiálů. Jílové materiály lze rozdělit do několika skupin, které se liší svou strukturou a mají také různé texturní vlastnosti. Proto je nezbytná znalost základních texturních charakteristik těchto látek, jako je tvar, šířka, objem a klasifikace pórů, porozita, specifický povrch, skutečná a zdánlivá hustota, jakož i vhodné metody pro jejich stanovení. Příkladem charakterizace jílových materiálů je stanovení strukturních charakteristik kaolinitu, bentonitu a montmorillonitu pomocí adsorpčních izoterem. Adsorpční izotermy byly měřeny na analyzátorech ASAP 2020 a 3Flex za použití techniky adsorpce dusíku při teplotě kapalného dusíku. Ze získaných adsorpčních izoterem byl určen pomocí metody Brunauer-Emmett-Teller specifický povrch (S_{BET}), pomocí metody t-plot specifický povrch ($S_{t\text{-}plot}$) a objem mikropórů. U všech zmíněných vzorků byly navíc určeny skenovací adsorpční izotermy. Skenovací izotermy poskytují důležité informace o geometrii sítě pórů, včetně její konektivity a distribuce velikosti pórů, které nelze odhalit z hlavních adsorpčních a desorpčních izoterm. Závěrem lze říci, že ačkoli existuje široká škála metod použitelných pro charakterizaci textury jílu, každá metoda má svá omezení, která je třeba vzít v úvahu při vyhodnocování výsledků.

[1] S. Brunauer, P. H. Emmet a E. Teller. (1938): J. Am. Chem. Soc. 60, 309.

[2] R.Cimino, K. A. Cychosz, M. Thommes, A. V. Neimark, Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects 437 (2013) 76–89.

3Po17
STABILIZED GOLD NANOPARTICLES BY POLYDIACETYLENES

Lenka Loukotová[1], Olha Lytvynenko[1], Jiří Schimer[1], Petr Cígler[1]

[1]*Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, v.v.i. Flemingovo nám. 2, 16610 Prague 6, Czech Republic, lenka.loukotova@uochb.cas.cz*

Because of their unique properties, gold nanoparticles (AuNPs) provide a powerful platform for the applications in various interdisciplinary fields, including medicine and biology. Their optical and electronic properties can be adjusted by changing their size, surface chemistry, shape and aggregation state [1]. However, biological systems contain high concentration of glutathione (GSH), a tripeptide with a free -SH group (up to 10 mM) [2]. Therefore, the stability of AuNPs stabilized by thiolated ligands, which are widely used, is in biological environment insufficiently low.

In this work, a new photopolymerizable ligand was designed to increase the stability of AuNPs in biological systems. The ligand comprised of (i) a terminal carboxylic group which enables electrostatic stabilization of AuNPs; (ii) a diacetylene moiety which is polymerized upon UV irradiation and (iii) lipoic acid which guarantees preferable binding to the AuNPs surface. Employing this ligand, stabilized AuNPs in the size range of 17 to 40 nm were prepared. The following photo-crosslinking of the diacetylene moieties upon UV irradiation created a polymer network on the AuNPs surface resulting in exceptionally high colloidal stability of AuNPs in GSH solution. Furthermore, the terminal -COOH groups were partially modified with clickable azide groups using aminopropylazide and the fluorescent dye (Atto663-DNA-dibenzocyclooctyne) was then attached to the surface of AuNPs.

The incubation of AuNPs with the non-crosslinked ligand in 20 mM GSH for 24 h released 95 % of the ligand bearing the fluorescent dye, while the incubation of AuNPs with the crosslinked ligand in 20 mM GSH released of only 6 % of the ligand, pointing to an excellent stability of AuNPs with the crosslinked ligand in biological systems.

[1] X. Jiang et al., *Chem. Sci*., 11, 923-936 (2020).

[2] A. Meister, *J. Biol. Chem.*, 263, 17205-17208 (1988).

3Po18
CESIUM FLUORO–, OXO– AND OXO–FLUORO–ALUMINATES: SYNTHESIS, AND THEIR STABILITY

František Šimko[1], Zuzana Netriová[1], Aydar Rakhmatullin[2], Michal Korenko[1]

[1]*Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, 845 36 Bratislava, Slovakia, zuzana.netriova@savba.sk*
[2]*Conditions Extrêmes ét Matériaux: Haute Température et Irradiation, CEMHTI, UPR 3079 - CNRS Univ. Orléans 450 71, Orléans, France*

A critical evaluation of the chemistry and the thermal stability of cesium fluoro-, oxo- and oxo-fluoro-aluminates in the $CsF–AlF_3–Al_2O_3–Cs_2O$ system were carried out.

Precise research of the binary $CsF–Al_2O_3$ sub-system was done by means of combining X-ray powder diffraction, high field solid state NMR spectroscopy, and thermal analysis methods. Cs_3AlF_6, $CsAlO_2$, $Cs_2Al_{22}O_{34}$ and new phase, $Cs_2Al_2O_3F_2$, were identified in the system. The structure of this new cesium oxo-fluoro-aluminate was determined. It is build up from single layers of oxygen connected (AlO_3F) tetrahedra, those layers being separated into by fluorine atoms. The thermal analysis of $CsF–Al_2O_3$ system revealed that it can be more defined as a pseudo-binary sub-system of the more general quaternary $CsF–AlF_3–Al_2O_3–Cs_2O$ system. From phase analysis of individual phase fields, the mutual metastable behavior of all founded phases can be considered. Fluoro- and oxo-aluminates are metastable precursors of thermodynamically more stable structure of cesium oxo-fluoro-aluminates.

This study was financially supported by the Slovak Grant Agencies (VEGA-2/0046/22; APVV-19-0270). We acknowledge the facilities of "IR RMN" at the NMR 850MHz spectrometer.

3Po19
PLASMONIC SILVER NANOLAYERS-MODIFIED SURFACES FOR MICROTHERMAL-INDUCED SUBCELLULAR-TARGETED PROTEIN DAMAGE IN CELLS

Ales Panacek[1], Lucie Hochvaldova[1], Martin Mistrik[2], Zdenek Skrott[2]

[1]*Department of Physical Chemistry, Faculty of Science, Palacký University in Olomouc, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, Czech Republic, ales.panacek@upol.cz*
[2]*Laboratory of Genome Integrity, Institute of Molecular and Translational Medicine, Faculty of Medicine and Dentistry, Palacky University, Olomouc, Czech Republic*

Diverse pathologies implicate heat shock and proteotoxic stress, but no reliable methodology to inflict defined exists. Here we present a single cell method compatible with laser-scanning microscopes, which adopts plasmon resonance principle to inflict targeted thermal protein damage. Protein damage in subcellular compartments via dose-defined heat then causes rapid heat-shock chaperone recruitment and ensure the engagement of the ubiquitin–proteasome system, which provides insights into the spatiotemporal response to thermal damage relevant for degenerative diseases. This approach can be applied to elucidate cellular stress-response pathways that are emerging as promising therapeutic agents and therefore find a broad applicability in biomedicine. This method using plasmonic properties of silver nanoparticles has been later tasted and discovered that HSP70 chaperone and its interactors are recruited to sites of thermally damaged proteins within seconds and mechanistically important determinants of such HSP70 recruitment were reported. Besides that, involvement of p97(VCP) translocase in the processing of heat-damaged proteins has been demonstrated.

The authors gratefully acknowledge financial support from the Ministry of Health of the Czech Republic (project NU20-05-00165) and Internal Student Grant Agency of the Palacký University in Olomouc, Czech Republic (IGA_PrF_2023_024).

[1] Mistrik, M.: *Nat. Commun*. 12, 1 (2021).

3Po20
CONTROLLING ULTRASMALL GOLD NANOPARTICLES: IMPORTANCE OF SIZE AND STRUCTURE FOR THE STUDY OF CATALYTIC ACTIVITY

Radka Pocklanová[1], Jan Stehlík[1], Aneta Bužková[1], Aleš Panáček[1], Robert Prucek[1], Libor Kvítek[1]

[1]*Department of Physical Chemistry, Faculty of Science, Palacký University Olomouc, 17. listopadu 1192/12, Olomouc, 771 46 Czech Republic, radka.pocklanova@upol.cz*

After the discovery of catalytic activity of metal nanoparticles (NPs), in heterogenous processes have been emerged. Unique properties of gold nanoparticles (Au NPs) are widely used for catalytic reaction. The common trend of understanding behavior of gold nanoparticles is that the smaller are more reactive. It is reported here, that this is not rule in the catalytic processes 0, 0. Our research activities were focused on determination of size-depent catalytic activity of synthesized Au NPs in the model reaction of 4-nitrophenol reduction with sodium borohydride. The Au NPs were synthesized by the reduction method of tetrachloroauric acid using sodium borohydride and hydrazine in presence of polymer polyvinylpyrrolidon (PVP) at various concentrations to control the size and distribution of gold nanoparticles. The particle size has been tuned in the range of 1 to 15 nm. Interestingly, the catalytic activity depend on the size becoming highest when the average size was around 3 nm. Variation in the size and determination of the most convenient size of gold nanoparticles for catalytic activity were discovered. The Langmuir-Hinshelwood reaction mechanism is accounted for evaluation of k_{app} values with comparison to Eley-Rideal mechanism. The above results reveal that Au NPs catalyst demonstrates excellent catalytic performance for nitro-compound reductions at room temperature with corresponding calculation of thermodynamic values.

The work is also funded by the Palacky University Institutional support and IGA grant (Project No. IGA-PrF-2022-029).

[1] Liang, C., et al. Size-Dependent Catalytic Behavior of Gold Nanoparticles. *Advanced Materials Interfaces*, 2022, 9.4: 2100867.
[2] Astruc, D. Introduction: nanoparticles in catalysis. *Chem. Rev.*, 2020, 120.2: 461-463.

3Po21
DESIGN AND SYNTHESIS OF POLYDENTATE PYCLEN-BASED LIGAND SUITABLE FOR COMPLEXATION OF MANGANESE(II) AND OTHER (BIOLOGICALLY) RELEVANT METAL IONS

Marie Pražáková[1], Bohuslav Drahoš[1]

[1]*Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, Palacký University Olomouc,17. listopadu 12, 77146 Olomouc, Czech Republic, marie.prazakova01@upol.cz*

Magnetic resonance imaging (MRI) is a powerful technique used for medical diagnosis. Due to its low sensitivity use of so-called contrast agents (CAs) is often required to enhance the image resolution. The contrast agents (CAs) currently used in clinics are complexes with paramagnetic metal ion Gd (III). Their use is regarded to be safe, but a few cases of adverse effects have been reported [1]. As a result, there has been a search for safer alternatives. Given its five unpaired d^5 electrons, slow electronic relaxation and fast water exchange – Mn(II) seems to be an appropriate candidate. However, only a few Mn(II) containing complexes fulfilled all requirements for safe *in vivo* use due to a challenging ligand design [2, 3].

Since the penta- or hexadentate ligands could be considered for Mn(II) complexation in order to achieve higher stabilities, better kinetic inertness and good efficiency, we decided to modified pyclen derivate 3,9-PC2A [3] with additional pendant arm – **L** (**Fig. 1).** This modification should also to possibility to form heterobimetallic complex which could lead to potential *theranostics* (combination of therapy and diagnostics), *metallostar* complex with high MRI efficiency or MRI/OI (Optical Imaging) combined probe. All the synthetic routes and their results will be discussed and presented.

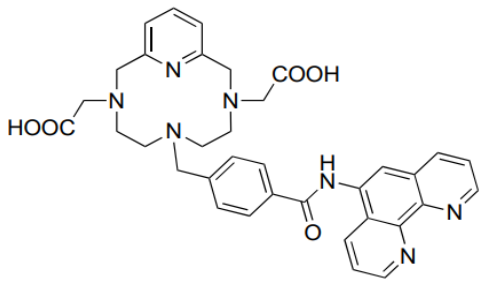


Fig. 1 Structure of 3,9-PC2A pyclen derivate **L** containing phenatroline-based pendant arm

The authors acknowledge the financial support from the project of student grant competition at Palacký University Olomouc IGA_PrF_2023_007. M.P.

acknowledges the financial support from Palacký University Endowement fund 2022.

[1] Rogosnitzky, M.; Branch S.: *BioMetals. 29*, 365 (2016).
[2] Drahos, B.; Lukes I.; Toth, E.: *Eur. J. Inorg. Chem.*, 1975(2012).
[3] Garda, Z. et al.: *Inorg. Chem. 60*, 1133 (2021).

3Po22
PŘÍPRAVA NANOKOMPOZITU OXIDU ŽELEZA A NANOČÁSTIC KOBALTU PRO APLIKACI DEGRADACE ETHINYLESTRADIOLU

Robert Prucek[1], Karolína Zrníková[1], Aneta Bužková[1]

[1]*Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. Listopadu 12, 771 46, Olomouc, Česká Republika, robert.prucek@upol.cz*

Nárůst populace provází zvýšení užívání léčivých látek a jejich následný zvýšený výskyt v životním prostředí. Tyto látky obvykle negativně ovlivňují živočichy, kteří jsou jim permanentně vystavováni. Jednou z těchto látek je i ethinylestradiol, který se používá v hormonálních antikoncepcích. Tyto látky zasahují do funkce endrokrinního systému a narušením funkce hormonů, které se vyskytují standardně v lidském těle. Estrogenními hormony je skupina přirozených hormonů (estron, estradiol, estriol, či syntetický hormon ethinylestradiol. který je obdobou je obdobou přírodního estradiolu [1].

V prezentované práci byla testována degradace ethinylestradiolu za využití pokročilých oxidačních technik (AOP). K tomuto účely byly požity a připraveny nanočástice $CoFe_2O_4$ a jakožto oxidační činidlo byl využit persíran draselný. Byl sledován vliv teploty a hodnoty pH na průběh a efektivitu degradace ethinylestradiolu. Jako nejefektivnější se ukázaly nanočástice $CoFe_2O_4$ připravené z chloridových solí výše zmíněných kovů, Kdy při poměru 500 mg/l peroxodisíranu draselného a 50 mg/l $CoFe_2O_4$ bylo po 30 sekundách odstraněno 94% ethinylestradiolu.

Tato práce vznikla za podpory interního grantu Univerzity Palackého v Olomouci IGA_PrF_2023_29.

[1] Zuo, Y., Zhang, K. & Zhou, S. Determination of estrogenic steroids and microbial and photochemical degradation of 17α-ethinylestradiol (EE2) in lake surface water, a case study. *Environ. Sci. Process. Impacts* 15, 1529–1535 (2013).

3Po23
VLIV MORFOLOGIE POLYMERU NA UKOTVENÍ STŘÍBRNÝCH NANOČÁSTIC METODOU LIFT

Jakub Siegel, Jana Pryjmaková, Daniel Grossberger

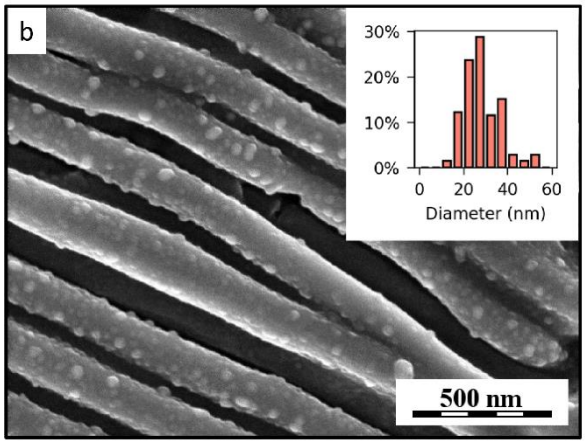
Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, jakub.siegel@vscht.cz

Polymery ošetřené kovovými nanostrukturami představují klíčový materiál zodpovědný za specifickou antibakteriální reakci v medicínských aplikacích. Jejich výraznějšímu rozšíření však zatím brání zajištění optimálního baktericidního účinku v kombinaci s přijatelnou mírou cytotoxicity, která je pro kovové nanostruktury typická.

Tato studie zkoumá možnost pevného ukotvení nanočástic stříbra (AgNP) do polyetheretherketonu (PEEK) s přizpůsobenou povrchovou morfologií, která vykazuje laserem indukované periodické povrchové struktury (LIPSS). Prokázali jsme, že technologie laserem iniciovaného dopředného přenosu (LIFT) je vhodným nástrojem, který za specifických podmínek umožňuje rovnoměrnou dekoraci povrchu PEEK stříbrnými nanočásticemi, bez ohledu na to, zda je povrch planární nebo strukturovaný [1]. Antibakteriální testy prokázaly, že LIPSS s imobilizovanými AgNPs představují účinnější baktericidní ochranu než jejich planární protějšky, i když obsahují nižší koncentraci částic.

Nanostrukturovaný PEEK s imobilizovanými AgNPs může otevřít nové možnosti při výrobě templátů pro replikační procesy při konstrukci funkčních baktericidních biopolymerů nebo může být přímo použit v aplikacích tkáňového inženýrství.

Ag/LIPSS/PEEK



Obr. 1 Laserem indukované periodické nanostruktury na PEEK s imobilizovanými AgNPs.

Autoři děkují za finanční podporu tohoto výzkumu Grantové agentuře ČR v projektu číslo 22-04006S.

[1] Siegel J., Vyhnalkova B., Savenkova T., Pryjmakova, J., Slepicka P., Slouf M., Hubacek T.: Surface Engineering of AgNPs-Decorated Polyetheretherketone. *Int. J. Mol. Sci.* 24, (2023).

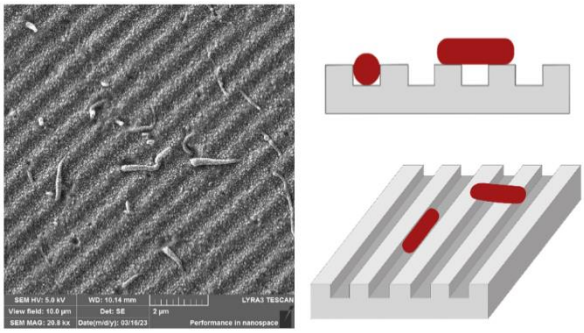
3Po24
REPLIKACE BIOPOLYMERU PLLA A JEHO ANTIBAKTERIÁLNÍ VLASTNOSTI

Petr Slepička[1], Dominik Fajstavr[1], Nikola Slepičková Kasálková[1], Bára Frýdlová[1]

[1]*Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, 166 28 Praha, Česká republika, petr.slepicka@vscht.cz*

Návrh funkčních mikro- nebo nanostrukturo–vaných povrchů patří mezi zajímavá témata materiálového výzkumu pro jejich multifunkční vlastnosti a pro širokou škálu potenciálních aplikací v biomedicínské oblasti, elektronice či mikrofluidice. Do popředí zájmu se dostal vývoj antimikrobiálních povrchů jako možné řešení rezistence na antibiotika. Mnoho nedávných studií se zaměřuje na vývoj alternativního přístupu k prevenci uchycení bakterií vytvářením texturovaných povrchových struktur, inspirovaných přirozeně se vyskytujícími antibakteriálními povrchy. Tyto struktury mohou být snadno vyrobeny různými litografickými technikami a mohou být dále posíleny synergickým efektem kombinací výše uvedených struktur s materiály s dobrými antibakteriálními vlastnostmi (např. Ag).

V rámci našeho výzkumu byly připraveny mikro/nanostrukturované substráty pomocí metody replikace soft litografie a termální imprintové litografie, byly vytvořeny nanostrukturované filmy na bázi kyseliny poly(L-mléčné) (PLLA) obohacené tenkými stříbrnými filmy nanesenými PVD. Hlavní vzory byly vyrobeny replikací povrchových vzorů optických disků, což se ukázalo jako snadná, rychlá a levná metoda pro vytváření relativně velkých plošných vzorovaných povrchů. Jejich antimikrobiální aktivita byla zkoumána *in vitro* proti bakteriálním kmenům *Escherichia coli* (Obr. 1) a *Staphylococcus epidermidis*. Výsledky ukázaly, že filmy s nanovzorem neovlivnily bakteriální růst ve srovnání s původními PLLA filmy významně, nicméně filmy s integrovaným stříbrem na replikovaných nanovzorech vykazovaly vynikající antibakteriální aktivitu proti oběma bakteriálním kmenům.



Obr. 1 SEM snímek uchycení *E. coli* na vzorovaném povrchu PLLA (10 µm, vlevo) a ilustrace bakteriálního osídlení povrchu (vpravo).

Tato práce byla podpořena grantem Grantové agentury ČR č. 22-04006S.

3Po25
PŘÍPRAVA Au A Cu NANOSTRUKTUR NA PERIODICKY VZOROVANÉM PEN PRO BIOAPLIKACE

Nikola Slepičková Kasálková[1], Jakub Siegel[1], Jana Pryjmaková[1], Petr Slepička[1]

[1]*Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha, Česká republika, nikola.kasalkova@vscht.cz*

Přestože je mnoho ušlechtilých kovů známo pro své antibakteriální vlastnosti, jejich účinek na zdravé buňky může být toxický. Z tohoto důvodu je velmi důležitý správný výběr kovů, které zachovávají antibakteriální účinek a zároveň jsou biokompatibilní. Cílem této práce byla příprava LIPSS metalizovaných zlatem a mědí a následné ověření biokompatibility připravených kovových nanodrátů. Polyethylennaftalát byl ošetřen KrF excimerovým laserem tak, aby došlo k vytvoření specifické laserem indukované periodické struktury (LIPSS). Poté bylo na modifikovaný PEN deponováno Au. Mikroskopií byla odhalena závislost morfologie povrchu na úhlu dopadu laserového paprsku. Test cytotoxicity potvrdil bezpečnost testovaných vzorků. Současně byl po 72 hodinách od inkubace pozorován pozitivní vliv na buněčnou proliferaci. Bylo prokázáno, že monometalické Au nanodrátky mohou být použity v biomedicínských aplikacích a pozitivně ovlivňují biokompatibilitu. Druhým kovem, který byl deponován na LIPSS bylo Cu. EDS a XPS stanovilo rozložení Cu v nanodrátech i jejich postupnou oxidaci. Stanovení smáčivosti odhalilo hydrofobní charakter povrchu Cu/PEN. Naše studie naznačuje, že kombinace laserového texturování povrchu a vakuového napařování může být efektivní a jednoduchou metodou pro přípravu nanokompozitu Cu/polymer s

potenciálním využitím v bioaplikacích; je však třeba mít na paměti, že dochází k postdepoziční oxidaci Cu, což může otevřít nové strategie pro další biologické aplikace.

Autoři děkují za podporu grantu GAČR č. 21-05506S.

3Po26
Bi_2O_2Se THERMOELECTRIC PROPERTIES COMPARISON STUDY

Antonín Sojka[1], Jan Zich[1], Jiří Navrátil[1], Ludvík Beneš[1], Tomáš Plecháček[1], Čestmír Drašar[1]

University of Pardubice, Faculty of Chemical Technology, Studentská 95, 532 10 Pardubice, antonin.sojka@student.upce.cz

Bi_2O_2Se is a 2D layered material with potential applications in thermoelectrics. In this work, a series of polycrystalline Bi_2O_2Se samples with altered stoichiometry were prepared. They were characterized by X-ray diffraction, electrical conductivity, Seebeck coefficient and thermal conductivity. Thermoelectric (TE) data were measured as a function of temperature in the range of 300 K to 773 K. We came across a specific issue where significant variations in TE properties compared to the recently published data on undoped Bi_2O_2Se are apparent. Furthermore, even the published data from various sources are inconsistent. We also compared TE properties of published data on doped samples with our samples with altered stoichiometry and found similarities. Based on a thorough investigation, we have reached several conclusions that are relevant to this problem. We argue that the solubility of the doped elements is very limited. Instead, the doping process mainly induces changes in the stoichiometry of the parent Bi_2O_2Se. This is associated with formation of native point defects and foreign phases. It is worth noting that both native defects and foreign phases are mostly not observable by X-ray methods.

3Po27
SONOCHEMICKÁ PŘÍPRAVA VRSTEV NANO A SUBMIKRONOVÝCH ČÁSTIC STŘÍBRA PRO DETEKCI LÁTEK POMOCÍ POVRCHEM ZESÍLENÉ RAMANOVY SPEKTROSKOPIE

Barbora Štefková[1], Robert Prucek[1], Tomáš Ingr[1]

[1]*Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. Listopadu 12, 771 46, Olomouc, Česká Republika, barbora.stefkova@upol.cz*

Vývoj a optimalizace analytických technik, které by umožňovaly snadnou a rychlou detekci širokého spektra látek, například v oblastech kontroly kvality potravin nebo detekce polutantů ve vodách, je stále žádanější. Typicky využívané vysoce citlivé a selektivní metody jako například GC-MS, jsou nicméně náročné na přístrojové vybavení, přípravu vzorku a čas samotného provedení. Povrchem zesílená Ramanova spektroskopie (SERS) představuje metodu s vysokým aplikačních potenciálem právě v oblastech, kde jsou žádané detekce látek ve stopových množstvích. Klíčovým faktorem pro efektivní využití SERS metody a dosažení nízkých limitů detekce je příprava substrátu, který bude generovat vysoké a konstantní zesílení Ramanova signálu [1].

Prezentované substráty byly připravovány na Al_2O_3 a na polyethyleniminem modifikované celulose pomocí ultrazvukem asistované redukce $[Ag(NH_3)_2]^+$ [2] pomocí maltosy. U těchto vrstev byl testován vliv modifikace nosného substrátu pomocí roztoku $SnCl_2$ na výslednou morfologii, velikost a vzájemné uspořádaní připravených částic. Za účelem optimalizace optických vlastností vrstev stříbra pro zvýšení SERS efektivity byla provedena u všech vzorků aktivace v 4mol·dm^{-3} roztoku NaCl. Charakterizace všech substrátů byla provedena pomocí SEM. Efektivita SERS substrátů byla vyhodnocena pomocí faktoru zesílení ze SERS spekter 10^{-5}mol·dm^{-3} roztoku adeninu, která byla naměřena lasery o vlnových délkách 532 nm a 780 nm. Získané faktory zesílení dosahovaly hodnot až $8{,}1 \cdot 10^5$.

Tato práce vznikla za podpory interního grantu Univerzity Palackého v Olomouci IGA_PrF_2023_29.

[1] P. Mosier-Boss: *Nanomaterials*, 7, 142 (2017).
[2] P. Suchomel *et al.*: *Ultrason. Sonochem.*, 32, 165–172 (2016).

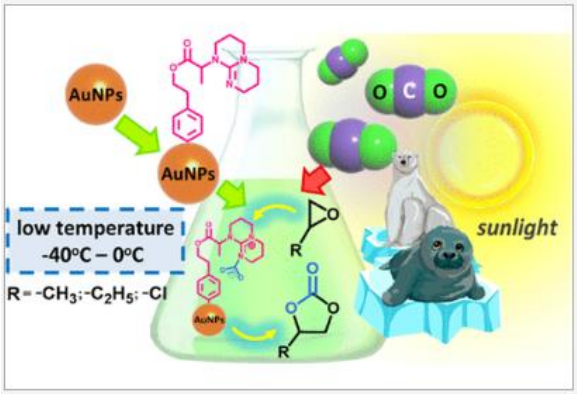
3Po28
FOTOINDUKOVANÁ KONVERZE CO_2 ZA ARKTICKÝCH PODMÍNEK

Anna Zabelina[1], Denis Zabelin[1], Zdeňka Kolská[2], Oleksiy Lyutakov[1], Václav Švorčík[1]

[1]*ÚIPL, FCHT, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 3, 16628 Praha, vaclav.svorcik@vscht.cz*
[2]*CENAB, PřF, Univerzita J. E. Purkyně v Ústí nad Labem, Pasteurova 15, 40096 Ústí nad Labem*

Přeměna CO_2 na čisté chemikálie je účinným nástrojem pro snižování negativních dopadů lidské činnosti na životní prostředí. V této práci ukazujeme, že zachycování CO_2 a jeho aktivace na základě slunečního záření může efektivně probíhat i při nízkých, prakticky arktických teplotách s implementací tzv. plasmonem asistované chemie. Navrhujeme specifický fotokatalyzátor sestávající ze dvou částí: (i) organického obalu odpovědného za zachycování CO_2 a (ii) jádra nanočástic z aktivního kovu plasmonu pro aktivaci zachyceného CO_2 a jeho zapojení do cykloadiční reakce. Byl studován vliv teploty na plasmonem podporovanou cykloadici CO_2 a byla pozorována reakce s pouze „mírnou teplotní závislostí“.

V této práci prezentujeme využití plasmonem asistovanou chemii zaměřenou na cykloadici CO_2 pro přípravu karbonátů (výchozí surovina pro výrobu polykarbonátů) při nízké teplotě (až -40 °C). Naše výsledky otevírají příležitosti pro využívání rozlehlých arktických a antarktických nebo jim blízkých území, kde se doposud velký solární potenciál prakticky nevyužívá.



Tato práce vznikla za podpory projektu Grantové agentury ČR č. 22-02022S.

[1] Zabelina A., Dedek J., Zabelin D., Miliutina E., Kolska Z., Siegel J., Svorcik V., Lyutakov O., *ACS Catal. 13*, 3830 (2023).

3Po29
STUDY OF PREPARATION AND CHARACTERIZATION OF ORGANIC PRECURSORS OF SINGLE-MOLECULE MAGNETS BASED ON 3d/4f METALS

Svitlana Vitushkina[1,2], Juraj Kuchár[3], Veronika Kuchárová[1]

[1]*Department of Materials Physics, Institute of Experimental Physics of the Slovak Academy of Sciences, Watsonova 47, 040 01 Košice, Slovakia, vitushkina@saske.sk*
[2]*Department of Applied Chemistry, Faculty of Chemistry, V.N.Karazin Kharkiv National University, Svobody Sq. 4, 61022, Kharkiv, Ukraine*
[3]*Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, Pavol Jozef Šafárik University in Košice, Moyzesova 11, 041 54Košice, Slovakia*

Single-molecule magnets (SMMs) of heterometallic 3d/4f complexes as well as homometallic complexes of 3d or 4f ions are very well known and the study of them grows exponentially [1]. Previous studies have pointed out the importance of the single-ion anisotropy parameter *D* and recently it has shown that a negative value of the parameter *D* is not necessary for SMM-type behavior and the origin is actively discussed [2].

The symmetry of the coordination polyhedron plays important role on both the sign and magnitude of *D* parameter and for the tuning of it the ligand is important. Schiff-bases rank among the most versatile organic intermediates with preference for transition metal and/or lanthanide ions [3].

This work is devoted to the study of azomethines´ preparation based on 2-hydroxy-benzaldehyde and its derivatives. The Schiff condensation reaction with heterocyclic 1,2,4-triazole derivative to increase the coordination capabilities of the ligand was carried out. Along with this, phenylenediamines were used in the synthesis of the *salen*-type ligands.

We were successful in preparation of two new ligands, as well as optimizing the conditions for the synthesis of three ones with phenylenediamines. We characterized them by elemental, thermal analysis, spectroscopic methods and structure analysis based on X-ray diffraction.

This research is funded by the European Union NextGenerationEU through the Recovery and Resilience plan for Slovakia under the project No. 09103-03-V01-00051. Furthemore, Svitlana Vitushkina thanks this project for the financial support of her stay

at the Institute of Experimental Physics Slovak Academy of Sciences.

[1] Tripathi S., et al.: *Organometallic Magnets.64*, 35 (2019).
[2] Kliuikov A., et al.: *New.J. Chem. 45(16)*, 7117 (2021).
[3] Pogány L., et al.: *New J. Chem. 43*, 13916 (2019).

3Po30
KOMPOZITNÍ MOF-UHLÍKATÉ MATERIÁLY PRO SORPCI VODÍKU

Jana Vyhlídalová[1], Tomáš Zelenka[1], Aleš Badač[1], Miroslav Almáši[2]

[1]*Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita, 30. dubna 22, 702 00 Ostrava, ČR, P22135@student.osu.cz*
[2]*Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika, Moyzesová 11, SK-04101 Košice, SR*

Příspěvek je zaměřen na způsob přípravy MOF-uhlíkatých kompozitů, které mohou být v budoucnu využity jako materiály pro skladování vodíku.

Pro přípravu kompozitů byl použit hierarchicky porézní uhlíkatý monolit (HPCM) [1] s vhodnou povrchovou modifikací v jehož pórech byla provedena syntéza MOF materiálu HKUST-1. Mateřské materiály a výsledné kompozity byly podrobeny sorpci vodíku při 77 K.

Bylo zjištěno, že adsorbované množství vodíku pro čistý MOF materiál HKUST-1 bylo přibližně 8,4 mmol/g, pro HPCM s příslušnou povrchovou modifikací přibližně 2,9 mmol/g. Kompozitní materiály vykazovaly značné zvýšení adsorbční kapacity oproti původnímu HPCM materiálu. Podrobnější informace budou prezentovány formou posteru.

Práce vznikla za podpory grantu SGS12/PřF/2023, LUASK22049 (INTER-EXCELLENCE II, M˘SMT), SK-CZ-RD-21-0068.

[1] Bulavová P., Parmentier J., Slovák V.: *Microporous Mesoporous Mater.* 272, 155 (2018).

3Po31
PYRIDINE-BASED MACROCYCLIC LIGANDS: SYNTHESIS OPTIMIZATION, COMPLEX PREPARATION AND THEIR ROLE IN THE FILED OF MOLECULAR MAGNETISM

Eva Zahradníková[1], Céline Pichon[2], Jean-Pascal Sutter[2], Radovan Herchel[1], Petr Halaš[1], Bohuslav Drahoš[1]

[1]*Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, Palacky University, 17. listopadu 12, CZ-771 46 Olomouc, Czech Republic, eva.zahradnikova01@upol.cz*
[2]*CNRS Laboratoire de Chimie de Coordination (LCC) - UPR 8241, 205 route de Narbonne - BP44099, 31077 Toulouse Cedex 4, France*

The beginning of the development of macrocyclic ligand chemistry dates back to 1968, when the first macrocyclic ligands were prepared by the template synthesis [1]. In contrast, the first single-molecule magnet was not described until more than 20 years later, leading to the development of molecular magnetism [2]. Since then, both fields have undergone great development, and a large number of both macrocyclic ligands and single-molecule magnets (SMMs) have been described and investigated. It was therefore proposed to combine the two fields and exploit the advantages of macrocycles for the targeted synthesis of magnetically interesting compounds [3, 4], which is the topic of this poster.

Three pentadentate 17-membered pyridine-based macrocyclic ligands were prepared. The cyclization step was optimized, the yield was significantly increased and the amount of side products was reduced. Subsequently, these systems were used for preparation of complexes with selected transition metals - in particular Co(II), which were investigated for their structural and magnetic properties. Most of these Co(II) complexes behaved as field-induced SMMs.

This work was supported by the project UP IGA_PrF_2023_007.

[1] Curtis, N. F., *Coord. Chem. Rev., 3(1)*, 3–47, (1968).
[2] Gatteshi, D., Sessoli, R., Villain, J.: *Molecular Nanomagnets*, Oxford University Press, New York (2006).
[3] Sutter, J.-P., et al.: *Chem. Soc. Rev. 51*, 3280–3313 (2022).
[4] Zahradníková, E., Herchel, R., Šalitroš, I., Císařová, I., Drahoš, B. *Dalton Trans., 49(26*), 9057–9069 (2020).

3Po32

GRAPHENE AS A PROMISING ADDITIVE TO HIERARCHICALLY POROUS CARBON MONOLITHS FOR ENHANCED H_2 AND CO_2 SORPTION

Gabriela Zelenková[1], Tomáš Zelenka[1], Miroslav Almáši[2], Michala Soldánová[1,3]

[1]University of Ostrava, Faculty of Science, Department of Chemistry, 30. dubna 22, 702 00 Ostrava, Czech Republic, gabriela.zelenkova@osu.cz
[2]Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, P.J. Safarik University, Moyzesova 11, 040 01 Kosice, Slovak Republic
[3]Laboratory of clinical immunology and serology, SPADIA LAB, Dr. Martínka 7, 700 30 Ostrava, Czech Republic

This study aimed to synthesize hierarchically porous carbon monoliths (HPCM) doped with graphene oxide (GO) for H_2 and CO_2 sorption. Different amounts of GO (0.5%, 2%, and 10% by weight) were added, and carbonization temperatures of 500 °C and 900 °C were used. The reduction of GO to graphene was achieved during synthesis. Characterization techniques included Raman spectroscopy, FTIR, SEM, TEM, and elemental analysis to assess GO reduction and incorporation into the HPCM matrix. The higher temperature of 900 °C promoted greater reduction and resulted in enhanced (ultra)microporosity, especially with 10% GO addition. Sorption experiments at 77 K and 273 K evaluated the materials' performance for H_2 and CO_2 adsorption, respectively. At 500 °C, any amount of GO reduced adsorption capacity for CO_2 (from 2.4 to 1.8 mmol g^{-1}) and H_2 (from 5.8 to 3.6 mmol g^{-1}) compared to pristine HPCM. However, with 10% GO and 900 °C, a promising material was achieved with H_2 adsorption of 9.6 mmol g^{-1} and CO_2 adsorption of 4.6 mmol g^{-1}, showing industrial potential.

The authors acknowledge the assistance provided by the Research Infrastructure NanoEnviCz, supported by the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic under Project No. LM2018124 and by SGS16/PřF/2022.

POSTERY - SEKCIA 4
ORGANICKÁ CHÉMIA

4Po01

TVORBA C–C VÄZIEB POMOCOU C–H AKTIVÁCIÍ NA BIARYLOVÝCH SUBSTRÁTOCH

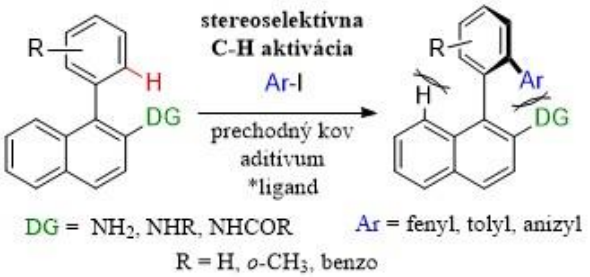
Tomáš Čičvák, Martin Putala

Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra organickej chémie, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava 4, cicvak2@uniba.sk

Oligoarylové zlúčeniny sa často využívajú ako ligandy v stereoselektívnej syntéze, ale taktiež majú svoje využitie v optoelektronike ako LC, OFET alebo OLED materiály. Takéto oligoaryly sa najčastejšie pripravujú kaplingovými reakciami za vzniku novej C–C väzby [1]. Atraktívnym trendom na tvorbu nových C–C väzieb sú C–H aktivácie, pri ktorých je regioselektívne aktivovaná C–H väzba. Regioselektivitu C–H aktivácii ovplyvňuje orientujúca skupina, ktorú obsahuje východiskový substrát. Tá má možnosť koordinovať prechodný kov a tak priamo aktivovať C–H väzbu [2].

V tomto projekte sa zameriavame na atroposelektívny priebeh C–H arylácií na biarylových substrátoch. Predpokladáme možnosť stereoselektívne indukovať C–H aktivácie pomocou chirálnych ligandov v katalytickom komplexe, indukovaním axiálnej chirality vzniknutých oligoarylov. Cieľom projektu je optimalizácia C–H arylácií na biarylových substrátoch výberom vhodne orientujúcej skupiny, optimalizácia reakčných podmienok a rozpracovanie atroposelektívneho priebehu C–H arylácií.

Prezentované budú výsledky optimalizácie arylácií C–H aktiváciou na arylnaftylových substrátoch, pričom druh orientujúcej skupiny (amino, etylamino, acetamido) sa ukázal rozhodujúci pre regioselektivitu týchto arylácií. Ďalej bude prezentovanú prezentované pokusy o zabezpečenie stereoselektívneho priebehu týchto reakcií (obr. 1).



Obr. 1. Schematické znázornenie stereoselektívnych C–H aktivácií na arylnaftylových substrátoch.

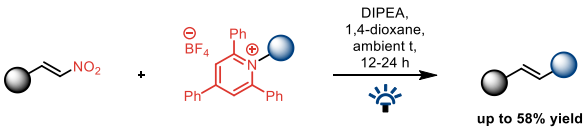
[1] Imrie, C. T.; Henderson, P. T.: *Chem. Soc. Rev. 36*, 2096 (2007).
[2] Gandeepan, P.; Ackermann, L.: *Chem. 4*, 199 (2018).

4Po02
VISIBLE-LIGHT-MEDIATED DENITRATIVE CROSS-COUPLING

Katarína Ráchel Detková[1], Branislav Ferko[1], Michaela Marčeková[1], Jana Doháňošová[1], Dušan Berkeš[1], Pavol Jakubec[1]

[1]*Department of Organic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Bratislava, Radlinského 9, 811 07, Slovakia, katka.detkova@gmail.com*

Cross-coupling reactions stand among the most important synthetic transformations in the field of organic chemistry. For decades, transition-metal catalyzed reactions dominated the coupling scene, however that changed due to the rapid progress in photoredox catalysis [1], electrochemical transformations [2], and the long-sustainability demands. Novel reactions employing various new cross-coupling partners were also developed. Particularly popular became *β*-nitrostyrenes, typically bench-stable solids easily accessible *via* the Henry reaction−dehydration sequence. We have envisaged that a general and catalyst-free radical denitrative C−C cross-coupling of nitrostyrenes operating under mild conditions would significantly enhance the rapidly expanding field of new sustainable cross-couplings (Scheme 1) [3]. The stereoselective visible-light-induced reaction of nitrostyrenes and Katritzky salts proceeds without any catalyst at ambient temperature. Broad in scope and tolerant to multiple functional groups, the moderately yielding transformation is orthogonal to several traditional metal-catalyzed cross-couplings.



Scheme 1. Photochemical transformation of nitrostyrenes

This research was supported by the Slovak Research and Development Agency and VEGA under Contract No. APVV-20-0298 and VEGA 1/0411/22.

[1] Cavalcanti, L. N., Molander, G. A.: Top. Curr. Chem. 374, 39 (2016).
[2] Wang, H., Gao, X., Lv, Z., Abdelilah, T., Lei, A.: Chem. Rev. 119, 6769−6787 (2019).
[3] Ferko B., Marčeková M., Detková K. R., Doháňošová J., Berkeš D., Jakubec P.: Org. Lett. 23, 8705-8710 (2021).

4Po03
SYNTHESIS OF NEW PERYLENE DERIVATIVES VIA RING-EXPANSION REACTION

Lucia Feriancová[1], Ivana Císařová[2], Martin Kotora[1]

[1]*Charles University, Faculty of Science, Department of Organic Chemistry, Hlavova 8, 128 43, Prague, Czech Republic, lucia.feriancova1@gmail.com*
[2]*Charles University, Faculty of Science, Department of Inorganic Chemistry, Hlavova 8, 128 43, Prague, Czech Republic*

Nowadays, polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) with five or more fused aromatic rings attract a lot of attention due to their unique chemical and physical properties resulting in applications in various fields of material chemistry. They have been utilized in organic light-emitting diodes, solar cells, lasers, and nonlinear optics [1]. Despite being one of the most widespread classes of organic compounds, the synthesis of PAHs is still challenging. Recently we have shown a new approach to synthesize PAHs employing on-surface chemistry on Au with indenofluorene-based system [2, 3]. Substrates with indenofluorene scaffold showed to be potentially attractive for different structural modifications, such as strain-induced rearrangement, cyclodehydrogenation, or planarization. Therefore, they were applied in the presented study.

In this work, we focused our attention on the synthesis of the various substituted perylene derivatives followed by the study of their photo-physical properties. The target materials were obtained by seven steps from commercially available materials (Fig. 1). Crucial precursors – indenofluorenes – were transformed via ring-

expansion reaction to [5]-helicenes which undergo Scholl cyclization upon oxidation and formed planar perylenes.

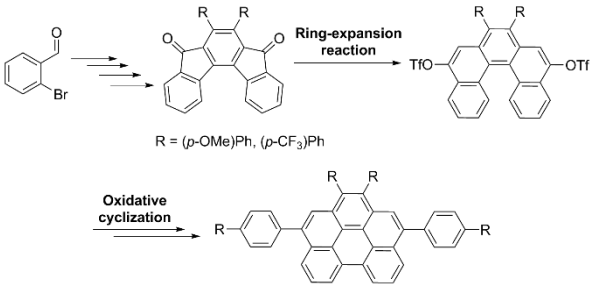


Fig. 1 Synthetic approach to perylene derivatives.

Financial support: European Structural and Investment Funds (No. CZ.02.2.69/0.0/0.0/18_053/0016976), Czech Science Foundation (Grant No. 31-39639L).

[1] Li Q., Zhang Y., Xie Z., Zhen Y., Hu W.y Dong H.: *J. Mater. Chem C.* 10, 2411 (2022).
[2] Kaiser R. P., Nečas D., Cadart T., Gyepes R., Císařová I., Mosinger J., Pospíšil L., Kotora M.: *Angew. Chem., Int. Ed. 58* (48), 17169 (2019).
[3] Mallada B., de la Torre B., Mendieta-Moreno J. I., Nachtigallová D., Matěj A., Matoušek M., Mutombo P., Brabec J., Veis L., Cadart T., Kotora M., Jelínek P.: *J. Am. Chem. Soc.* 143, 14694 (2021).

4Po04
BROMINATED DIAMOND SURFACE AS A REACTIVE INTERMEDIATE FOR FURTHER DERIVATIZATIONS

Ema Fialova[1], Jakub Copak[1], Jiri Schimer[1], Petr Cigler[1]

[1]*Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, of the CAS, Flemingovo nam. 2, Prague, Czechia, cigler@uochb.cas.cz*

Nanodiamonds (NDs) containing nitrogen-vacancy (NV) centres are promising candidates for quantum sensing applications. NV colour centres are defects in the crystal lattice that exhibit unique optical and magnetic properties. They can be initialized and read out optically and do not suffer from photobleaching. Their functionality is affected by the functional groups on the surface, it is desirable to attach electronegative groups as close to the surface as possible. Azide and amine groups are beneficial for further attachment of different molecules such as proteins or nucleic acids. However, direct azidation and amination remain challenging.

In this work, we utilized brominated nanodiamonds [1] as a reactive intermediate for azidation and amination of the NDs. The azide and amine termination was achieved through nucleophilic substitution of bromine atoms. For comparison, we also prepared aminated NDs via high-temperature amination [2] and azidated NDs by decarboxylative azidation [3]. The amount and accessibility for modification of reactive azide groups on the surface of each sample was compared through copper-catalysed alkyne-azide and copper-free bicyclo[6.1.0]non-4-yne (BCN)-azide click reactions. The amount of reactive amine groups of each sample was determined through a reaction with an NHS ester-modified reporting molecule. Our results indicate that brominated NDs are effective precursors in preparation of azidated NDs while for aminated NDs, high-temperature amination is more efficient.

[1] Melendrez C. et al.: *Phys. Chem. Lett.*, 1147-1158 (2022).
[2] Laube C. et al.: *Mater. Chem. Front.*, 2527-2540 (2007).
[3] Kennedy Z. et al., *Langmuir*, 2790-2798 (2017).

4Po05
XMAN – VERSATILE LIPID NANOPARTICLES FOR NUCLEIC ACID DELIVERY

Bedřich Formánek[1], Pavel Švec[1], Lenka Loukotová[1], Václav Vaněk[1], Anastasiia Priss[1], Veronika Aulichová[1], Silvia Petrezselyová[1], Andrea Brázdová[1,2], Lenka Vaneková[1], František Sedlák[1], Petr Cígler[1], Klára Grantz Šašková[1,2]

[1]*Institute of Organic Chemistry and Biochemistry of the Czech Academy of Sciences, Flemingovo náměstí 542/2, 166 10 Praha 6-Dejvice, Czech Republic, bedrich.formanek@uochb.cas.cz, pavel.svec@uochb.cas.cz, vaclav.vanek@uochb.cas.cz*
[2]*Department of Genetics and Microbiology, Charles University and Research Center BIOCEV, Průmyslová 595, 252 50 Vestec, Czech Republic*

Lipid nanoparticles (LNPs) have proven to be currently the most advanced nonviral nucleic acid delivery system, especially in the field of vaccine development and gene delivery [1]. They are usually composed of: a) cationic lipid – essential for negatively charged nucleic acid entrapment, b) cholesterol – influencing the membrane fluidity or lipid packing, c) helper lipid – facilitating membrane fusion and thus increasing transfection efficacy, d) PEGylated lipid – decreasing protein adsorption and furnishing the protection of LNP from the immune system [2].

Recently, we have developed ionizable adamantane-based lipidoids called XMANs that act as a delivery system for nucleic acid delivery with remarkable versatility. The XMAN6 allows to deliver: 1) siRNA into human primary

hepatocytes and cell lines – both known to be hard-to-transfect, 2) mRNA into mouse liver, 3) plasmid DNA, and 4) 2',3'-cGAMP into cells [3].

Herein, we focused on comparing the in vivo efficacy of ionizable XMAN lipidoids in terms of their tolerability, immunogenicity, and protein expression, with FDA approved LNPs.

[1] Hou X., Langer R., Dong Y.: *Nat. Rev. Mater. 6*, 1078 (2021).

[2] Kulkarni J. A., Witzigmann D., Leung J., Tam Y. Y. C., Cullis P. R.: *Nanoscale 11*, 21733 (2019).

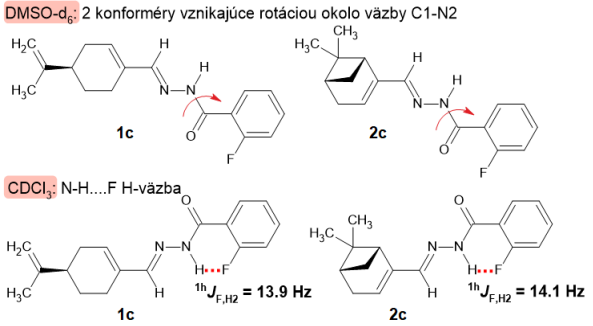
[3] Hejdánková Z., Vaněk V., Sedlák F., Procházka J., Diederichs A., Kereïche S., Novotná B., Budešínský M., Birkuš G., Grantz Šašková K., Cígler P.: *Adv. Funct. Mater. 31*, 2101391 (2021).

4Po06
SYNTÉZA, ŠTRUKTÚRA A FARMAKOLIGICKÝ PROFIL *N*-ACYLHYDRAZÓNOV ODVODENÝCH OD PERILLALDEHYDU A MYRTENALU

Monika Garberová[1], Mária Vilková[1], Ivan Potočňák[1], Monika Tvrdoňová[1], Martina Bago-Pilátová[2], Zuzana Kudličková[1], Alexandra Kešeľáková[2], Ján Elečko[1]

[1]*Univerzita Pavla Jozefa Šafárika, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Moyzesova 11, 04001 Košice, monika.garberova@student.upjs.sk*
[2]*Univerzita Pavla Jozefa Šafárika, Lekárska fakulta, Ústav farmakológie, Trieda SNP 1, 04001 Košice*

N-Acylhydrazóny predstavujú významnú skupinu dusíkatých zlúčenín, ktoré nachádzajú svoje uplatnenie v medicíne vďaka antivírusovým, antibakteriálnym či cytotoxickým účinkom [1]. Syntetizované boli nové *N*-acylhydrazóny odvodené od monoterpenoidov perillaldehydu a myrtenalu. Štruktúry nových *N'*-[(*E*)-[(4S)-4-(prop-1-én-2-yl)cyklohex-1-én-1-yl]metylidén]benzohydrazidov **1a–g** a *N'*-[(*E*)-{6,6-dimetylbicyklo[3.1.1]hept-2-én-2-yl}metylidén]benzohydrazidov **2a–g** boli študované v roztoku aj tuhom stave, a to pomocou FT-IR, HRMS a NMR spektroskopie a kryštalografickej analýzy. Deriváty obsahujúce atóm fluóru v *orto*-polohe fenylového jadra vykazujú rozdielne konformácie v roztoku a v pevnom stave. ^{1}H NMR spektrá derivátov **1c** a **2c** merané v DMSO-d_6 pri laboratórnej teplote obsahujú dve sady signálov, čo potvrdzuje existenciu dvoch konformérov, u ktorých dochádza ku vzájomnej premene rotáciou okolo amidovej väzby C–N. Kinetika konverzie konformérov **1c** a **2c** v DMSO-d_6 bola študovaná dvojrozmernou výmennou spektroskopiou (2D EXSY). V ^{1}H NMR spektrách zlúčenín **1c** a **2c** meraných v $CDCl_3$ a acetóne-d_6 bolo pozorované štiepenie signálu protónu H-2 na dublet v dôsledku tvorby H-väzby. Prítomnosť H-väzieb N–H···O=C a N–H···N bola potvrdená FT-IR spektrami. V kryštálovej štruktúre sú medzi molekulami derivátov **1f**, **2a** a **2b** vodíkové väzby N–H···O, pre derivát **2c** boli pozorované aj H-väzby N–H···N. Syntetizované hydrazóny **1c** a **1g** vykazovali vynikajúce antiproliferatívne účinky voči leukemickej bunkovej línii Jurkat s hodnotami IC_{50} 3,8 a 4,2 μM. Tieto výsledky naznačujú, že syntetizované zlúčeniny sú sľubnými protinádorovými látkami [2].



Obrázok 1

Táto práca vznikla s finančnou podporou grantov VEGA 1/0148/19 a 1/0653/19.

[1] I. Hamzi, T.M. Barhoumi-Slimi, R. Abidi, Synthesis, characterization, and conformational study of acylhydrazones of α,β-unsaturated aldehydes, Heteroat. Chem. 3 (2016) 139–148.

[2] M. Garberová, I. Potočňák, M. Tvrdoňová, M. Bago-Pilátová, S. Bekešová, Z. Kudličková, E. Samoľová, A. Kešeľáková, J. Elečko, M. Vilková, Spectral, structural, and pharmacological studies of perillaldehyde and myrtenal based benzohydrazides, Journal of Molecular Structure, 1271 (2023) 134112.

4Po07
SYNTÉZA AMIDŮ KYSELINY SKOŘICOVÉ S ANTIMIKROBIÁLNÍ AKTIVITOU

Tomáš Strhársky[1], Dominika Pindjaková[2], Jaroslava Jamrichová[1], Juliana Lavičková[1], Veronika Kadlecová[1], Jiří Kos[3], Tomáš Goněc[1], Josef Jampílek[2]

[1]*Ústav chemických léčiv, Farmaceutická fakulta, Masarykova univerzita, Palackého tř. 1946/1, 612 00 Brno, t.gonec@seznam.cz*
[2]*Katedra analytickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava*
[3]*Biochemický ústav, Lékařská fakulta, Masarykova univerzita, Kamenice 753/5, 625 00 Brno*

Příroda je inspirativním a bohatým zdrojem sloučenin s biologickou aktivitou. Většina léčiv schválených pro klinické využití v posledních 30

letech byly malé molekuly buď přímo přírodního původu, nebo strukturní analoga přírodních produktů. Mnoho rostlinných sekundárních metabolitů vykazuje biologickou aktivitu a slouží jako předloha pro výzkum a vývoj syntetických analog. Jedním takovým příkladem je kyselina skořicová a její deriváty, jako například kyselina kumarová, ferulová, kávová, nebo sinapová, které můžeme izolovat z mnoha rostlinných zdrojů. Kyselina skořicová a její deriváty vykázaly zajímavou antimikrobiální, antiproliferační, antiparazitickou, neurologickou a protizánětlivou aktivitu [1].

Substituované N-fenyl amidy kyseliny 3,4-dichlor skořicové byly předmětem dřívějších studií [2, 3]. Některé deriváty vykázaly výbornou antimikrobiální a antimalarickou aktivitu. Nově syntetizované látky, které jsou předmětem této studie, jsou přímými strukturními analogy těchto látek lišící se v substituci fenylu. Bylo syntetizováno a charakterizováno 40 derivátů s vícečetnou substitucí jak elektrondonorními, tak elektronakceptorními skupinami a byla stanovena antimikrobiální aktivita proti grampozitivním bakteriím rodu Staphylococcus. Některé deriváty vykázaly výbornou aktivitu srovnatelnou s klinicky používanými antibiotiky ampicilinem a ciprofloxacinem.

Práce vznikla za podpory projektu MUNI/A/1210/2022.

[1] Ruwizhi, N.; Aderibigbe, B.A.: *Int. J. Mol. Sci.* 21, 5712 (2020).
[2] Strharsky, T.; et al.: *Int. J. Mol. Sci. 23*, 15090 (2022).
[3] Bak, A.; et al.: *Int. J. Mol. Sci. 24*, 3611 (2023).

4Po08
CU(II) COMPLEXES OF *O,N,O*-QUINAZOLINONE DONOR LIGANDS AS NEW BIOACTIVE COMPOUNDS

Jana Hricovíniová[1], Renáta Vadkertiová[2], Zuzana Hricovíniová[2]

[1]*Department of Cell and Molecular Biology of Drugs, Faculty of Pharmacy, Comenius University, 832 32 Bratislava, Slovakia*
[2]*Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, 845 38 Bratislava, Slovakia, Zuzana.Hricoviniova@savba.sk*

Transition metal complexes play a key role in anticancer therapy. The best known platinum-based compounds are used in almost 50% of all cancer treatments. Despite their widespread use, high toxicity and severe side effects are often observed [1]. Therefore, ongoing efforts are focused on the metal-based compounds with lower toxicity and novel mechanisms of action. In the search for biologically active compounds, new Cu(II) complexes were synthesized using *O,N,O*-quinazolinone donor ligands. Quinazolinones represent a privileged scaffold in medicinal chemistry [2, 3]. Structural features allow them to interact with metal ions to form stable chelates. In addition, complexation with metals modifies their pharmacological properties.

This research is focused on the evaluation of biological properties of quinazolinone Schiff bases and their Cu(II) complexes. Compounds were screened for their antiproliferative activity against several human cancer cell lines. The antimicrobial potential was evaluated against a panel of both pathogenic yeast species and the yeast species which cause food spoilage. Results showed that the Cu(II) complexes were much more effective than free ligands. These findings confirm the significant impact of chelation on bioactivity and suggest that Cu(II) complexes can be considered as promising candidates for further biological studies.

This work was financially supported by Slovak grant agency VEGA 2/0071/22 and VEGA 2/0151/22.

[1] Uddin M.N., Ahmed S.S., Rahatul A.S.M. *J. Coord. Chem. 73*, 3109 (2020).
[2] Hameed A., Al-Rashida M., Uroos M., Ali S.A., Khan K.M. *Expert Opin. Ther. Pat. 28*, 281 (2018).
[3] Hricovíniová, J.; Hricovíniová, Z.; Kozic, K. *Int. J. Mol. Sci., 22*, 610 (2021).

4Po09
HALOGENATED PRALIDOXIME DERIVATIVES AS POTENTIAL REACTIVATORS OF INHIBITED CHOLINESTERASES: SYNTHESIS AND *IN VITRO* EVALUATION

Karolína Knittelová[1], David Malinak[1,2], Adela Fuchsova[1], Rudolf Andrys[1], Kamil Musilek[1,2]

[1]*University of Hradec Kralove, Faculty of Science, Rokitanskeho 62, 500 03 Hradec Kralove, Czech Republic, karolina.knittelova@uhk.cz*
[2]*University Hospital in Hradec Kralove, Biomedical Research Center, Sokolska 581, 500 05 Hradec Kralove, Czech Republic*

Acetylcholinesterase (AChE) reactivators with an oxime group are used as an antidote to organophosphate (OP) poisoning, while butyrylcholinesterase (BChE) reactivators are suitable for pseudocatalytic uptake of OPs. OPs act as irreversible AChE inhibitors, inhibition of AChE cause disfunction of cholinergic activity, which can lead to fatal consequences for the

organism [1]. The modification of the already known structure of pralidoxime reactivator aims primarily to overcome problems associated with physicochemical properties. One of the main disadvantages of quaternary pyridinium oximes, which have a permanent positive charge, is poor penetration through the blood-brain barrier (BBB), making them ineffective in the central nervous system [2]. The introduction of a substituent that could contribute to increased lipophilicity can thus ensure better penetration into the BBB. At the same time, an electron acceptor substituent in a suitable position relative to the oxime group on the pyridinium ring can reduce its pK_a value and thus lead to easier formation of the oximate anion [3]. The aim of this work is to synthesize new halogenated oxime reactivators derived from the structure of pralidoxime and determine their stability and pK_a values. Finally, the new derivatives will be measured *in vitro* for their ability to reactivate OP-inhibited cholinesterases.

This work was supported by Czech Science Foundation (No. GA21-03000S).

[1] Musilek K. et al.: *Med. Res. Rev. 31*, 548 (2011).
[2] Gorecki L. et al.: *Arch. Toxicol. 90*, 2831 (2016).
[3] Zorbaz T., Malinak D. et al.: *J. Med. Chem. 61*, 10753 (2018).

4Po10
NONSYMMETRICAL MONOQUATERNARY AMMONIUM SALTS AS POTENTIAL REACTIVATORS OF INHIBITED CHOLINESTERASES: SYNTHESIS AND *IN VITRO* EVALUATION

Zuzana Kohoutova[1], David Malinak[1,2], Rudolf Andrys[1], Marketa Neugebauerova[1], Miroslav Psotka[1,2], Kamil Musilek[1,2]

[1]*University of Hradec Kralove, Faculty of Science, Rokitanskeho 62, 500 02 Hradec Kralove, Czech Republic, zuzana.kohoutova@uhk.cz*
[2]*University Hospital in Hradec Kralove, Biomedical Research Center, Sokolska 581, 500 05 Hradec Kralove, Czech Republic*

Acetylcholinesterase (AChE) and butyryl–cholinesterase (BChE) can be irreversibly inhibited by organophosphates (OPs, e.g., sarin). Inhibition of AChE is life threatening due to caused cholinergic crisis but inhibition of BChE has no adverse effects. Therefore, BChE can detoxify OPs before they reach AChE in the central nervous system. Reactivators are compounds containing oxime group, which cleaves the OP moiety from the enzyme active site. There are commercially available reactivators of AChE (e.g., asoxime) but they have few downsides. There is no broad-spectrum reactivator, and they have difficulties to pas BBB due to their double-charged structure [1]. Nowadays the research is focusing on development of reactivators of BChE as well because by joint administration of BChE and reactivator we can establish so-called pseudocatalytic bioscavenger [2]. Promising results showed compounds called „K-oximes "– K027, K048 and K203. Moreover, it was demonstrated, that halogen atoms in the structure decrease pK_a value of the oxime group which results in increased formation of oximate ion (active form) [3]. The aim of this research is synthesis and *in vitro* evaluation of monoquaternary analogues of K027 and K048 with or without halogen substituents and observation of the effect of the charge on the physicochemical properties and on biological activity.

This work was supported by Czech Science Foundation (No. GA21-03000S).

[1] Gorecki L. et al.: *Arch. Toxicol.* 90, 2831 (2016).
[2] Masson P. et al.: *Arch. Biochem. Biophys.* 494, 107 (2010).
[3] Zorbaz T., Malinak D. et al.: *Eur. J. Med. Chem.* 238, 114377 (2022).

4Po11
SYNTÉZA A BIOLOGICKÁ AKTIVITA NOVÝCH DERIVÁTŮ RHODANINU A THIAZOLIDIN-2,4-DIONU

Adéla Šimková[1], Enikő Šikorová[1], Šárka Štěpánková[2], Klára Konečná[1], Ondřej Janďourek[1], Jarmila Vinšová[1], Martin Krátký[1]

[1]*Univerzita Karlova, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Akademika Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, martin.kratky@faf.cuni.cz*
[2]*Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Studentská 573, 532 10 Pardubice*

Rhodanin a jeho oxo analog thiazolidin-2,4-dion patří k významným heterocyklickým scaffoldům se širokým spektrem biologických aktivit. U jejich derivátů byly popsány mj. antimikrobní, protizánětlivá či cytotoxická aktivita, ale též inhibice různých enzymů [1-3].

Za účelem přípravy potenciálních antimikrobních sloučenin a inhibitorů cholinesteráz jsme proto připravili nové anilidy rhodanin-3-octové kyseliny, jejich oxo analoga, C5 substituované deriváty a také 3,5-disubstituované sloučeniny. Anilidy byly připraveny z výchozích kyselin v dostatečných výtěžcích, obvykle pomocí EDC/HOBt couplingu, u stericky náročnějších

substrátů pak pomocí chloridu fosforitého, C5 substituované deriváty pak Knoevenagelovou kondenzací.

U všech sloučenin byla otestována jejich antimikrobní účinnost (osm bakteriálních a houbových kmenů, pět kmenů mykobakterií) a dále inhibiční aktivita vůči acetylcholinesteráze (AChE) a butyrylcholinesteráze (BChE) pomocí Ellmanovy metody. Připravené sloučeniny inhibovaly bakterie s minimální inhibiční koncentrací od 125 µM, houby od 62,5 µM a mykobakterie od 15,625 µg/ml. Naměřené hodnoty IC_{50} byly od 25,9 µM pro AChE a 2,9 µM pro BChE, zde se jednalo se o kompetitivní inhibici. V rámci studie se podařilo identifikovat vztahy mezi strukturou a biologickou aktivitou, kdy chemickými modifikacemi je možno modulovat biologickou aktivitu žádaným směrem. Cytotoxicita je v současné době v testování.

„Projekt Národní institut virologie a bakteriologie (Program EXCELES, ID: LX22NPO5103) – Financováno Evropskou unií – Next Generation EU.“

[1] Kratky M., Sramel P., Bodo P., Soltesova Prnova M., Kovacikova L., Majekova M., Vinsova J., Stefek M.: *Eur. J. Med. Chem. 246*, 114922 (2023).
[2] Krátký M., Štěpánková Š., Vorčáková K., Vinšová J.: *Bioorg. Chem. 68*, 23 (2016).
[3] Mousavi S.M., Zarei M., Hashemi S.A., Babapoor A., Amani A.M.: *Artif. Cells Nanomed. Biotechnol. 47*, 1132 (2019).

4Po12
DETERMINATION OF pK_a OF ADAMANTANE-BASED LIPID NANOPARTICLES

Olha Lytvynenko[1], Václav Vaněk[1], Anastasiia Priss[1], Klára Grantz Šašková[1], Petr Cígler[1]

[1]*Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Czech Academy Sciences, Flemingovo n. 2, Prague 6, 166 10, Czech Republic, olha.lytvynenko@uochb.cas.cz*

In recent years, lipid nanoparticles (LNPs) containing ionizable lipids have developed into the most promising systems for delivery of various therapeutic agents including nucleic acids [1]. The structure and pH-sensitivity of such systems provide *biocompatibility*, minimalize interactions with anionic membranes of blood cells as well as facilitate endosomal escape of the nanoparticles.

Herein, we have focused on ionizable adamantane-based lipidoids containing 3 basic nitrogen atoms (XMAN), as those structures were found to be promising for functional delivery of numerous types of nucleic acids, even into cells that are known to be difficult to transfect [2].

We have synthesized series of XMANs and compared their behaviour to SM-102 lipidoid (Moderna vaccine) using their apparent dissociation constants (pK_a). The pK_a of XMAN-based LNPs decreases with the increase in the length of the used RNA molecule. Change in the buffer composition after purification of the LNPs by dialysis leads to a decrease in pK_a value for both XMAN and SM102. Changes in the concentrations of the XMAN-based LNPs used in the assay can also affect the resulting pK_a values.

[1] Hou X., Zaks T.: *Nat. Rev. Mater.* 6, 1078 (2021).
[2] Hejdankova Z., Vanek V.: *Adv. Funct. Mater.* 31, 2101391 (2021).

4Po13
INDUKOVANÉ ŠTIEPENIE N-N A C-F VÄZIEB AROMATICKÝCH PERFLUÓROVANÝCH HYDRAZÓNOV - NOVÁ METÓDA SYNTÉZY AROMATICKÝCH A HETEROAROMATICKÝCH NITRILOV A 2,3,5,6-TETRAFLUÓRANILÍNU

Dušan Bortňák[1], Daniel Végh[1], Branislav Pavílek[1], Viktor Milata[1]

[1]*Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava, Slovakia, viktor.milata@stuba.sk*

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, ale tiež v materiálovej chémií. Hydrazóny boli tiež identifikované ako silné lapače radikálov a ich viaccieľové vlastnosti boli kombinované ako potenciálne liečivá na Alzheimerovu chorobu (AD). Zistilo sa, že hydrazóny sú veľmi dobrými inhibítormi tvorby amyloidných beta fibrilov a oligomérov, zároveň vykazujú vysoko účinné vlastnosti zachytávania radikálov [1]. *N*-Pentafluórfenyl hydrazóny možno pripraviť kondenzačnou reakciou príslušnej karbonylovej zlúčeniny s pentafluórfenylhydrazínom s katalytickým prídavkom kyselín alebo aj bez ich prídavku. V oblasti prípravy *N*-perfluórfenyl hydrazónov sa uskutočnila syntéza cca 50 derivátov pentafluórfenylhydrazónov reakciou pentafluórfenylhydrazínu s odpovedajúcimi aromatickými, heteroaromatickými a vybranými alifatickými 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*-perfluórfenylovom 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 a hetero–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 štrukturálna ohraničenosť reakcie (nitroskupina na aromatickom jadre a alifatické hydrazóny), študovali sa hmotnostné spektrá a fragmentácie [2, 3].

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

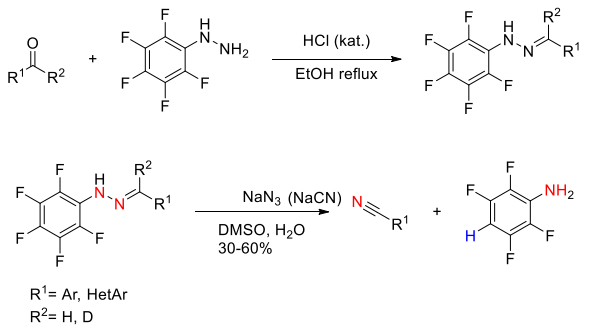


Schéma 1: Príprava a reaktivita *N*-pentafluórfenyl–hydrazónov

Tento príspevok vznikol vďaka podpore v rámci Operačného programu Integrovaná infraštruktúra pre projekt: „Strategický výskum v oblasti SMART monitorovania, liečby a preventívnej ochrany pred koronavírusom (SARS-CoV-2)“, Projekt č 313011ASS8, spolufinancovaný Európskym regionálnym rozvojom a Fondom Agentúry pre vedecko-technickú pomoc na základe zmluvy č. APVV-17-0513 a APVV-20-0213.

[1] Baier, A., Kokel, A., Horton, W., Gizińska, E., Pandey, G., Szyszka. R., Török, B., Török, M.: ChemMedChem. 1927, 16 (2021).
[2] Bortňák, D., Milata, V., Šofranko, J., Végh, D., Prousek, J., Barbieriková, Z., Breza, M., Brezová, V., Dvoranová, D., Šoral, M.: ChemistrySelect 3929, 13 (2020).
[3] Bortňák, D., Pecher, D., Végh, D., Breza, M., Mikuš, P., Milata, V.: J. Mass Spectrom. 4540, 55 (2020).

4Po14
SYNTHESIS OF NOVEL COMPOUNDS TARGETING NEUROINFLAMMATION AND CHOLINERGIC DEFICIT IN ALZHEIMER´S DISEASE

Miroslav Psotka[1], Zuzana Kohoutova[1], Karolina Knittelova[1], David Malinak[1], Rudolf Andrys[1], Kamil Musilek[1], Stanislav Gobec[2]

[1]University of Hradec Kralove, Faculty of Science, Department of Chemistry, Rokitanskeho 62, 500 03 Hradec Kralove, Czech Republic, miroslav.psotka@uhk.cz
[2]University of Ljubljana, Faculty of Pharmacy, Department of Pharmaceutical Chemistry, Askerceva 7, Sl-1000 Ljubljana, Slovenia

In the last decades, there is increase in ageing of population and increasing number of age-related neurodegenerative diseases. More than 35 million people (60-70% of all cases) affected worldwide, Alzheimer´s disease (AD) is the best-known form of senile dementia [1]. The main aim of this study is to design and synthesized novel anti-AD agents able to simultaneously target neuroinflammation by inhibiting p38 mitogen-activated protein kinase α (p38 MAPKα or p38α) and cholinergic deficit by inhibiting butyrylcholinesterase (BChE). That means these compounds should belong to a multi-target-directed ligands (MTDLs) group. Our group used two compounds that were developed for structure optimization towards designed lead compounds. First is selective p38α inhibitor (K_i = 101 *n*M) [2] and second compound is selective BChE inhibitor (K_i = 11.1 *p*M) [3]. These designed compounds should have better physical, chemical and biological properties. Because of future *in vitro* and *in vivo* testing, we are nowadays optimizing synthetic routes to lead compounds by reducing the number of synthetic steps and increasing yields for each target molecule.

This work was supported by Czech Science Foundation (No. GA22-42701L).

[1] Gauthier S., Rosa-Neto P., Morais J. A., Webster C.: World Alzheimer Report 2021: *Journey through the diagnosis of dementia* (2021).
[2] Roy S. M. et al.: *ACS Chem. Neurosci. 6*, 666-680 (2015).
[3] Kosak U. et al.: *J. Med.Chem. 61*, 119-139 (2018).

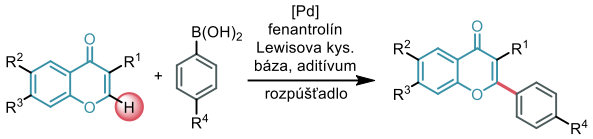
4Po15
C(2)-REGIOSELEKTÍVNA PRIAMA ARYLÁCIA CHROMÓNOV

Karin Schniererová[1], Henrieta Stankovičová[1], Martin Putala[1]

[1]*Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra organickej chémie, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovenská republika, karin.schniererova@uniba.sk*

Chromónový skelet, ktorý je stavebnou jednotkou mnohých bioaktívnych látok a chemosenzorov je odolný voči elektrofilným substitúciám na pyránovom kruhu, a tak sa ako vhodný spôsob jeho derivatizácie ukazujú priame C–H funkcionalizácie [1]. Nevyžaduje sa pre-funkcionalizácia substrátu, čo vedie k zníženiu ekonomickej aj ekologickej náročnosti syntéz. Výhodami tohto prístupu sú tiež možnosť ovplyvniť regioselektivitu výberom vhodného reakčného partnera a úpravou podmienok a rozšírenie škály použiteľných substrátov. V závislosti od reakčných podmienok je možné uskutočniť priamu alkenyláciu, alkinyláciu alebo aryláciu do rôznych polôh na chromóne [2, 3].

Práca je zameraná na optimalizáciu podmienok priamej arylácie chromónu v polohe C(2) za vzniku flavonoidov a štúdium vplyvu substituentov v polohách C(3), C(6) a C(7) na chromónovom skelete na priebeh reakcie. Navrhli sme metódu paládiom katalyzovanej arylácie chromónu s arylborónovou kyselinou ako arylačným činidlom v prítomnosti bázy a Lewisovej kyseliny s použitím fenantrolínu ako ligandu. Novou metódou bolo pripravených 7 flavonoidov vo výťažku 10-59 %.



Obr. 1 Priama arylácia chromónu s arylborónovou kyselinou ako arylačným činidlom.

Práca vznikla s podporou Grantu mladých UK, projekt č. UK/193/2023.

[1] Kang, D.; Ahn, K.; Hong, S.: *Asian J. Org. Chem. 7*, 1136 (2018).
[2] Kim, D.; Ham, K.; Hong, S.: *Org. Biomol. Chem. 10*, 7305 (2012).
[3] [3] Kim, D.; Hong, S.: *Org. Lett. 13*, 4466 (2011).

4Po16
FLUÓROVANÉ PYRÁNY AKO POTENCIÁLNE BIOLOGICKY AKTÍVNE LÁTKY

Klára Stankovianska[1], Mária Mečiarová[1], Radovan Šebesta[1]

[1]*Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra organickej chémie, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovenská republika, klara.stankovianska@gmail.com*

Heterocykly na báze chirálnych pyránov sa vyskytujú v rôznych prírodných, ako aj syntetických biologicky aktívnych zlúčeninách [1]. [4+2] Cykloadície predstavujú dobrý prístup k týmto heterocyklickým štruktúram [2]. V našej práci sme sa zamerali na štúdium asymetrickej oxa-Dielsovej-Alderovej reakcie s obrátenými elektrónovými požiadavkami fluórovaných β,γ-nenasýtených ketónov a α-ketoesterov, ktoré prebiehajú cez dienolátový medziprodukt v podmienkach mechanickej aktivácie v guľovom mlyne. Kvapalinou asistované mletie v kombinácií s vhodným organokatalyzátorom predstavuje účinnú metódu získania pyránov v krátkom čase, vo vysokých výťažkoch, s vysokou diastereo- a enantiomérnou čistotou. Reakcie poskytujú rôzne fluórované pyrány s tromi novými stereogénnymi centrami v dobrých výťažkoch (až 98 %) s *dr* >4:1 a s enantiomérnou čistotou do 92 % *ee*. Biologická aktivita pripravených produktov bude testovaná v blízkej budúcnosti.

Práca vznikla za podpory Vedeckej grantovej agentúry VEGA, projekt č. 1/0332/19 a grantu UK/147/2022.

[1] Meanwell, N. A. *J. Med. Chem. 61*, 5822 (2018).
[2] Xie, M.; Lin, L.; Feng, X. *Chem. Rec. 17*, 2 (2017).

4Po17
SYNTÉZA BOROVÝCH HETEROCYKLŮ VYCHÁZEJÍCÍ Z BIS(ENAMINOAMIDŮ)

Markéta Svobodová[1], Eliška Smejkalová[1], Nikol Švábková[1]

[1]*Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, marketa.svobodova@upce.cz*

Enaminoamidy patří do skupiny polarizovaných ethylenů. To jsou látky, které mají na jednom konci dvojné vazby elektrondonorní skupinu (např. aminoskupina) a na druhém konci skupinu elektronakceptorní (např. keton, amid, ester). Enaminoamidy reagují s diazonium-tetrafenylboráty za vzniku šestičlenných heterocyklických sloučenin s atomem boru uvnitř

kruhu [1, 2]. Některé z nich vykazují fluorescenční vlastnosti.

Tento příspěvek se zabývá reakcemi bis(enaminoamidů) **1** se substituovanými benzendiazonium-tetrafluorboráty (Schéma 1) nebo tetrafenylboráty. V prvním případě podléhá vzniklý azokopulační produkt **2** cyklizační reakci s difenylborinovou kyselinou za vzniku bis(oxazaborinů) **3** a oxazaborin-triazaborinů **4**. Pokud bis(enaminoamid) **1** reagoval se 4-methylbenzendiazonium-tetrafenylborátem, byly izolovány nejen sloučeniny **3** a **4**, ale také další izomerní varianty.

Některé z připravených heterocyklických sloučenin byly dále podrobeny reakci s BF_3–Et_2O, přičemž byly získány bis(bicyklické) nebo bicyklické sloučeniny.

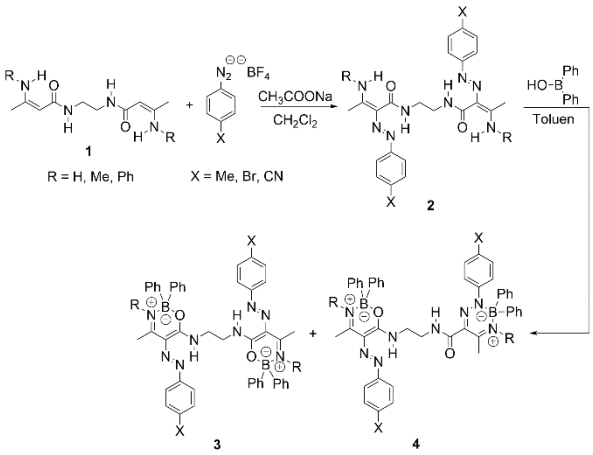


Schéma. 1

[1] Svobodová M., Bárta J., Šimůnek P., Bertolasi V., Macháček V.: *J. Organomet. Chem. 694*, 63 (2009).
[2] Svobodová M., Svoboda J., Li, B.-H., Bertolasi V., Socha, L., Sedlák M., Marek L.: *Molecules. 27*, 367 (2022).

4Po18
TOTÁLNA SYNTÉZA NOVÝCH PYROLIDÍNOVÝCH SFINGOMIMETÍK

Jana Špaková Raschmanová[1], Martin Fábian[1], Miroslava Martinková[1], Adam Sudzina[1], Martina Bago Pilátová[2]

[1]*Katedra organickej chémie, Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11, 040 01 Košice, jana.raschmanova@upjs.sk*
[2]*Ústav farmakológie, Lekárska fakulta, Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Trieda SNP 1, 040 11 Košice*

Nedávno, Dehoux a kol. identifikovali voľnú bázu **3** ako nekompetitívny inhibítor β-glukocerebrozidázy, ktorý by mohol vystupovať ako potenciálny farmakologický chaperón pre Gaucherovu chorobu [1]. Preto sme v rámci nášho výskumu, orientovaného na stereoselektívnu syntézu prírodných látok a ich analógov patriacich do rodiny sfingolipidov, sústredili našu pozornosť na prípravu cyklických štruktúr sfingolipidov, *C*-alkylpyrolidínov. Keďže štruktúry **1**.HCl−**5**.HCl, *ent*-**1**.HCl−*ent*-**2**.HCl, pripravené v našom laboratóriu už skôr, disponujú pozoruhodnou protirakovinovou aktivitou *in vitro* a štúdium vzťahu štruktúra-aktivita preukázalo, že konfigurácia substituentov na heterocyklickej jednotke, ako aj dĺžka hydrofóbneho reťazca, stereochémia vicinálneho diolového fragmentu a konfigurácia na uhlíku nesúcom príslušný alifatický reťazec je pre výsledný cytotoxický profil molekúl dôležitá [2, 3], realizáciou totálnej syntézy poslednej dvojice pyrolidínových sfingomimetík *ent*-**4**.HCl a *ent*-**5**.HCl z dimetylesteru kyseliny L-vínnej sme získali kompletnú knižnicu ôsmich možných stereoizomérov s naturálnou dĺžkou základnej uhlíkovej kostry (C_{18}). To nám následne umožní objasniť úlohu konfigurácie na heterocyklickom skelete vo vzťahu k sledovanej biologickej aktivite *in vitro*. Prezentovaná syntetická stratégia sfingomimetík *ent*-**4**.HCl a *ent*-**5**.HCl sa opierala o tri kľúčové transformácie: a) jednoduchý Overmanov prešmyk **6** kreujúci nové stereocentrum nesúce chránenú aminoskupinu; b) intramolekulovú nukleofilnú substitúciu zabezpečujúcu tvorbu pyrolidínových štruktúr **9** a **10**; c) skríženú metatézu alkénov v neskorom štádiu syntézy pre implementáciu lipofilného alifatického reťazca.

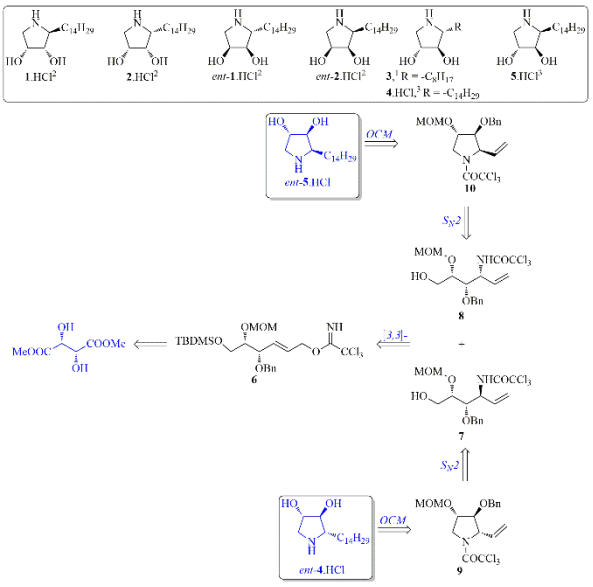


Schéma 1 Retrosyntetická analýza prípravy nových pyrolidínových sfingomimetík *ent*-**4**.HCl a *ent*-**5**.HCl.

Tento príspevok vznikol vďaka finančnej podpore VEGA 1/0278/23 a 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] Castellan T.; Garcia V.; Rodriguez F.; Fabing I.; Shchukin Y.; Tran M.L.; Ballereau S.; Levade T.; Génisson Y.; Dehoux, C.: *Org. Biomol. Chem. 18*, 7852 (2020).
[2] Fábianová D.; Pončáková T.; Martinková M.; Fábian M.; Fabišíková M.; Bago Pilátová M.; Macejová A.; Kuchár J.; Jáger D.: *Tetrahedron 96*, 132380 (2021).
[3] Pončáková T.; Fábian M.; Martinková M.; Novotná M.; Fabišíková M.; Tvrdoňová M.; Bago Pilátová M.; Nosalová A.; Kuchár J., Jáger D.; Litecká M.: *Tetrahedron 121*, 132910 (2022).

4Po19
STRUCTURE OF EXOPOLYSACCHARIDE PRODUCED BY CYANOBACTERIA NOSTOC CF. LINCKIA

Iveta Uhliariková[1], Mária Matulová[1], Jaromír Lukavský[2], Jozef Turjan[1], Peter Capek[1]

[1]*Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 84538 Bratislava, Slovakia, chemtur@savba.sk*
[2]*Institute of Botany, Academy of Sciences of the Czech Republic, Dukelská 135, 37982 Třeboň, Czechia*

Cyanobacteria (blue-green algae) are photo–synthetic prokaryotic microscopic organisms distributed throughout our planet, but mainly in water territories. They produce a wide range of metabolites found in cells, on their surface or released into the environment, and are therefore interesting for industrial or medical use. It was found that exopolysaccharides (EPS) are one of the most important secreted compounds due to their special physico-chemical properties and biological effects. They can be produced in the form of pure carbohydrates, proteoglycan or glycoprotein conjugates, depending on the type of cyanobacteria.

The cultivation of freshwater cyanobacteria Nostoc cf. linckia yielded a crude proteoglycan (cEPS) with a molecular weight of 1.31×10^5 g/mol. Its purification yielded two dominant fractions differing in molecular weight. The lower molecular weight fraction was subjected to structural studies. The results of structural analyses showed that three of the four dominant sugars, i.e. glucose, galactose and xylose, form a 1,4-linked main chain in the following order: [→4)-β-D-Xylp-(1→ 4)-β-D-Glcp-(1→ 4)-α-D-Galp-(1→ 4)-β-D-Glcp-(1→]$_n$. Furthermore, mannose has been identified as a terminal unit bound only in the side chains of every third xylose unit at the C3 position, and every second glucose is branched at C6 by 3-O-lactyl-β-D-glucuronic acid (nosturonic acid) [1].

This work was supported by the Scientific Grant Agency (VEGA) of the Ministry of Education, Slovak Republic (Grant No. 2/0054/22).

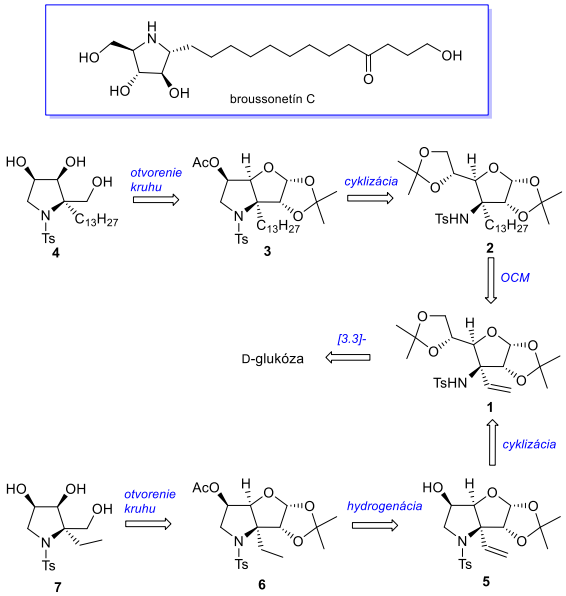
[1] Uhliariková I, Matulová M, Košťálová Z, Lukavský J, Capek P: Carbohydr Polym. 276, 118801 (2022).

4Po20
STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA NOVÝCH BROUSSONETÍNOVÝCH ANALÓGOV

Monika Tvrdoňová[1], Yuliia Zuzak[1]

[1]*Katedra organickej chémie, Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika, Moyzesova 11, 040 01 Košice, monika.tvrdonova@upjs.sk*

Polyhydroxylované alkaloidy vykazujú široké spektrum biologických aktivít, predovšetkým ako inhibítory rôznych typov glykozidáz [1, 2]. Významnými zástupcami tejto triedy zlúčenín sú broussonetíny, reprezentujúce rodinu imino–sacharidov, obsahujúcich pyrolidínové jadro s rôzne funkcionalizovaným reťazcom v pozícií C-5 (na Obr. 1 ilustrované broussonetínom C) [2]. Táto skupina prírodných látok, pôvodne izolovaných zo stromu *Broussonetia kazinoki*, je neustále rozširovaná novými analógmi, cez modifikáciu samotnej heterocyklickej jednotky alebo príslušného bočného ramena [3]. Navrhli sme stratégiu prípravy dvoch *C*-alkyl-tetrasubstituovaných derivátov **4** a **7** (Obr. 1). Syntéza oboch molekúl vychádzala z chirónu **1**, odvodeného z D-glukózy, s využitím [3.3]-sigmatropného prešmyku ako kľúčovej transformácie. Na zabudovanie C_{13} lipofilného fragmentu bola využitá mikrovlnami asistovaná OCM reakcia s komerčne dostupným tridec-1-énom v prítomnosti Grubbsovho katalyzátora druhej generácie. Pyrolidínový skelet bol vybudovaný S_N2-cyklizáciou s aplikáciou klasickej aktivácie primárneho hydroxylu u syntónu **1**, nasledovanou oxidatívnym štiepením furanózového kruhu. Za účelom konštrukcie zlúčeniny **7** bol terminálny vinyl u medziproduktu **5** redukovaný na príslušnú etylovú skupinu.



Obr. 1 Retrosyntéza prípravy nových pyrolidínových derivátov **4** a **7**.

Táto práca vznikla vďaka finančnej podpore grantov VEGA 1/0278/23 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] Nash, R.J., Kato, A., Yu, C.-Y., Fleet, G.W.: *Future Med. Chem. 3*, 1513 (2011).
[2] Shibano, M., Tsukamoto, D., Kusano, G.: *Heterocycles 57*, 1539 (2002).
[3] Byatt, B.J., Pyne, S.G.: *Curr. Org. Chem. 26*, 2071 (2022).

POSTERY - SEKCIA 5
VYUČOVANIE A HISTÓRIA CHÉMIE

5Po01
CHEMICKÉ A ŠTRUKTÚRNE ZLOŽENIE RESPIRÁTOROV A ICH VPLYV NOSENIA NA ROZPOZNÁVANIE EMÓCIÍ ŽIAKOV ZÁKLADNÝCH ŠKÔL A GYMNÁZIÍ

Lujza Grambličková, Monika Jerigová

Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, gramblickova1@uniba.sk

COVID-19 je respiračné ochorenie spôsobené koronavírusom, ktorý sa ľahko prenáša z infikovaného človeka na zdravého. Jedným z možných riešení ako zastaviť šírenie koronavírusu je nosenie respirátora. Respirátory sú zložené z bavlny a polypropylénových vlákien, ktoré svojim náhodným usporiadaním zachytávajú vírus. Do niektorých respirátorov sa pridávajú aj kovy ako meď a striebro, ktorých funkcia spočíva v zastavení rastu alebo zabíjaní vírusov [1]. Našou motiváciou bolo porovnať rôzne druhy respirátorov a zistiť ako vplývajú na rozpoznávanie emócií žiakov základných škôl a gymnázií. Prostredníctvom hmotnostnej spektrometrie sekundárnych iónov a skenovacieho elektrónového mikroskopu sme analyzovali tri vzorky respirátorov a to základný, respirátor s pridaným oxidom meďnatým a respirátor s naneseným striebrom. Správne nasadený respirátor zakrýva veľkú časť tváre, čo môže spôsobiť problémy pri neverbálnej komunikácii, najmä mimike, prostredníctvom ktorej vyjadruje človek emócie. Aký vplyv má nosenie respirátora na rozpoznávanie emócií žiakov základných škôl a gymnázií sme zisťovali pomocou online-dotazníka na internetovej platforme Google Forms. Výskumu sa zúčastnilo 66 žiakov vo veku od 10 do 15 rokov z rôznych škôl na Slovensku. Výsledky ukazujú, že nosenie respirátora spôsobuje problémy pri určovaní emócií ľudí, hlavne ako je smútok a strach. Pomocou dotazníka sme zistili aj to, že vzorka respondentov je málo informovaná o ochorení COVID-19.

[1] Govind V., Bharadwaj S., Sai Ganesh MR, et al.: *Biometals*. 34, 6 (2021).

5Po02
NITRACE FENOLU V PŘÍTOMNOSTI MIKROVLN JAKO VÝUKOVÝ EXPERIMENT

Zuzana Morávková[1], Jiří Havlíček[1], Rafael Doležal[2], Martin Bílek[2], Karel Kolář[2]

[1]*Přírodovědecká fakulta UHK, Hradecká 1285, 500 03 Hradec Králové*
[2]*Pedagogická fakulta UK, Magdalény Rettigové 4, 116 39 Praha, karel.kolar@pedf.cuni.cz*

Nitrace fenolu náleží k tradičním úlohám v rámci praktických cvičení z organické chemie. Ve většině případů se provádí jako reakce fenolu s kyselinou dusičnou nebo dusičnanem sodným a kyselinou sírovou v makroměřítku. V rámci trendů ve výuce chemie orientovaných na bezpečnost práce je žádoucí takové experimentální úlohy přiměřeným způsobem modifikovat [1-3].

Příkladem mohou být nitrace fenolu s využitím různých dusičnanů a kyseliny octové, které jsou realizovány v mikro- nebo semimikroměřítku v přítomnosti mikrovln. V této souvislosti jsme se orientovali na demonstraci průběhu nitrace fenolu s využitím dusičnanů různých kovů. V experimentu bylo použito dusičnanu sodného, dusičnanu vápenatého, dusičnanu měďnatého a dusičnanu železitého. Reakce byla prováděna za definovaných podmínek v komerční mikrovlnné troubě. Jestliže je při nitraci fenolu použito dusičnanu sodného, reakce neprobíhá, v přítomnosti dusičnanu vápenatého se tvoří mononitrofenoly. Při použití dusičnanu měďnatého vznikají mononitrofenoly a dinitrofenoly, reakce s dusičnanem železitým vede k dalšímu zvýšení obsahu dinitrofenolů v reakční směsi. Vlastní realizace experimentu umožňuje uplatnění badatelské metody, např. zkoumání vlivu reakčních podmínek či použitých reaktantů na průběh reakce. Experimenty jsou určeny pro studenty učitelství chemie, mohou být využity i v rámci workshopů pro studenty gymnázií.

Autoři děkují za podporu projektu Erasmus+ 2019-1-TR01-KA203-074692 DOSLECTEP a programu PedF UK Cooperatio.

[1] Šauliová, J.: Využití mikrovlnného ohřevu v laboratorních cvičeních studentů a pro demonstrační pokusy, *Chem. Listy, 96,* 9, 761 (2002)
[2] Yadav, U., Mande, H., Ghalsasi, P.: Nitration of Phenols Using $Cu(NO_3)_2$: Green Chemistry Laboratory Experiment, *J. Chem. Educ., 89,* 2, 268 (2012)
[3] Rusek, M., Sakhnini, S. Bilek, M.: Experiments Safety - The State of Art at Schools in Czechia. *Chem. Didact. Ecol. Metrol, 27,* 1-2, 153 (2022).

5Po03
MULTIMEDIÁLNÍ VZDĚLÁVÁNÍ V CHEMII

Radana Koudelíková[1], Pavel Štarha[1]

[1]*Přírodovědecká fakulta, katedra anorganické chemie, 17. listopadu 1192/12, Olomouc 779 00, koudra00@upol.cz*

Zařazování multimediálních technologií do výuky chemie, ať už na středních či vysokých školách se stává novodobým trendem. Postupem času tak dochází k přizpůsobení nejen výuky, ale i pohledu na metodiku, teorii nebo samotné kurikulum. Informační a komunikační technologie jsou součástí moderního života a jsou i neodmyslitelnou součástí budoucnosti. Pro správné zařazení těchto technologií do výuky chemie je nutné najít správnou rovnováhu mezi použitím technologie a praktickou, teoretickou výukou. Mezi rozšířené, ale ne zcela využité technologie ve výuce patří multimediální tvorba, jakožto fotografie a videozáznamy. Aby docházelo k tvorbě správných výukových materiálů, musí být nejen pochopen samotný princip tvorby, správná aplikace, ale i pohled a zájem studentů na danou problematiku. Natočením inspirativních demonstračních pokusů v oblasti anorganické, organické i obecné chemie, může dojít nejen k prohloubení znalostí, objasnění abstraktnosti pojmů, ale i posilnění motivace a zvýšení zájmu studentů o chemii samotnou. V následujícím příspěvku bude prezentováno správné využití moderních technologií a průzkum jejich zařazení v rámci výuky anorganické chemie na vysoké škole.

5Po04

PROFIL A ŠTUDIJNÝ PLÁN ABSOLVENTA NOVÉHO PROFESIJNE ORIENTOVANÉHO ŠTUDIJNÉHO PROGRAMU „CHEMICKÝ LABORANT - ŠPECIALISTA“

Zuzana Vargová[1], Miroslav Almáši[1], Michaela Rendošová[1], Renáta Oriňaková[1], Slávka Hamuľaková[1], Viktor Víglaský[1], Jana Šandrejová[1], Mária Ganajová[1], Jana Dinajová[2], Milan Burčák[3], Igor Danielovič[4], Igor Chomča[5], Peter Marcinov[6]

[1]Ústav chemických vied, Univerzita P.J. Šafárika, Moyzesova 11, Košice, 04 154, Slovensko, zuzana.vargova@upjs.sk
[2]DUSLO, a. s. Šaľa, výrobná prevádzka Strážske, Priemyselná 720, SK-07222 Strážske, Slovensko
[3]Kovohuty a.s. 29. augusta 1232, 053 42 Krompachy, Slovensko
[4]NPPC– Národné poľnohospodárske a potravinárske centrum – Výskumný ústav agroekológie Michalovce, Hlohovecká 2, 951 41 Lužianky, Slovensko
[5]Chemko, a.s. Slovakia, Prevádzka svetelných stabilizátorov, Priemyselná 720, 072 22 Strážske, Slovensko
[6]Kriminalistický a expertízny ústav Policajného zboru, odbor prírodovedného skúmania a kriminalistickej identifikácie, Kuzmányho 8, 041 02 Košice, Slovensko

Súčasná odborná verejnosť v oblasti chemického priemyslu ako aj verejných inštitúcií sa v poslednom období obracia na vzdelávacie inštitúcie v oblasti chémie s požiadavkou na kvalitné vzdelanie absolventov. Na základe toho Ústav chemických vied PF UPJŠ v Košiciach v spolupráci s odborníkmi z praxe pripravuje profesijne orientovaný študijný program. Študijný plán bol vypracovaný v spolupráci praxe a školy a je zameraný na profil absolventov, ktorí budú mať chemické a fyzikálne znalosti o vlastnostiach prvkov, ich zlúčeninách a štruktúrach, molekulových a makroskopických premenách a iných javoch, ktoré prebiehajú pri chemických procesoch počas výroby produktov chemického priemyslu. Absolventi budú mať teoretické a praktické znalosti zo základných vedných oblastí z oblasti chémie - anorganickej, analytickej, fyzikálnej, organickej chémie a biochémie ako aj z oblastí environmentálnej a farmaceutickej chémie, ekológie. Počas štúdia získajú aj IT zručnosti v jednotlivých oblastiach. V praxi sa absolvent dokáže orientovať v aplikáciách moderných prístrojových techník používaných v analytických laboratóriách v komerčnej i nekomerčnej sfére (chemická výroba, biotechnológie, zdravotníctvo, poľnohospo–dárstvo, životné prostredie, forenzná a pod.) a praktické skúsenosti získa počas dlhodobej praxe v poslednom semestri štúdia. Príspevok predstaví študijný plán ako aj vybrané témy záverečných prác študentov, ktoré budú vypracovávané v spolupráci s praxou.

Práca bola podporená Kultúrnou a edukačnou grantovou agentúrou MŠVVaŠ SR formou projektu číslo: KEGA 006UPJŠ-4/2021.

POSTERY - SEKCIA 6
APLIKOVANÁ CHÉMIA, ŽIVOTNÉ PROSTREDIE A POLYMÉRY

6Po01
DOES DIESEL CONTAMINATED SOIL AFFECT MISCANTHUS BIOMASS FOR FURTHER THERMAL UTILIZATION?

Hana Burdová[1], Zdenka Kwoczynski[1,2], Diana Nebeská[1], Karim Suhail Al Souki[1], Dominik Pilnaj[1], Barbora Grycová[3], Kateřina Klemencová[3], Pavel Leštinský[3], Pavel Kuráň[1], Josef Trögl[1]

[1]Faculty of Environment, Jan Evangelista Purkyně University, Pasteurova 3632/15, 40096, Ústí nad Labem, Czech Republic, Hana.burdova@ujep.cz
[2]ORLEN UniCRE Inc., Revoluční 84, 400 01, Ústí nad Labem, Czech Republic
[3]Institute of Environmental Technology, VSB - Technical University of Ostrava, 17. Listopadu 2171/15, 70800, Ostrava-Poruba, Czech Republic

The second-generation energy crop *Miscanthus x giganteus* (*Mxg*) produce high amount of biomass even in marginal or contaminated soils. It can be utilized energetically or transformed into various products. To evaluate potential effects on energetic biomass properties *Mxg* was grown in diesel contaminated soils. Combustion heat value reached average of 17.23 ± 0.21 $MJ \cdot kg^{-1}$; leaves had slightly but significantly decreased heat values while heat of other parts was comparable to control. No diesel impacts were observed on the pyrolysis products yield. Higher amounts of light hydrocarbons were detected in the pyrolysis gas from aboveground biomass from contaminated soil. Diesel contamination significantly decreased biochar surface. Concentrations of acids and esters in biooil were increased on the expense of concentrations of furans in the case of samples from contaminated soils. No significant effect on phenols and ketones concentrations in the biooil was observed. The amount of acetic acid, as the main biooil component, increased in the above- and below-ground plant parts along with the higher diesel concentrations in soil. Despite slight changes detected, the parameters of the biomass produced in diesel-contaminated soils present no obstacle to its energetic utilization and *Mxg* can be recommended for productive phyto–management of such soils.

6Po02
MODELLING OF GLYPHOSATE SORPTION ON ACTIVATED CARBON

Milan Bernauer[1], Kirill Iablochkin[1], Maryna Kantserova[1], Martin Zlámal[1], Vlastimil Fíla[1]

[1]University of Chemistry and Technology, Prague, Technická 5, 166 28 Praha 6, Czechia, iablochk@vscht.cz

Micropollutants (MP) are persistent substances added to water due to human activity. Although their low concentration (10^{-9} to 10^{-6}g l^{-1}), they can be a potential threat, especially in the long term. One of the important MP is glyphosate (GLY) a broad-spectrum widely used herbicide. Despite its positive soil-binding properties, GLY could accumulate in surface water and an efficient removal of GLY from wastewater raises the need for separation techniques such as GLY adsorption on granular activated carbon (GAC). Our study is aimed at studying the repeated adsorption of GLY on fresh/aged GAC to simulate the process of GLY removal procedures and to evaluate the long-term performance of GAC.

Granular activated carbon (Hydraffin CC, DONAU-CARBON) was characterized by BET and TGA/DSC methods. GLY sorption kinetics onto GAC was studied using BATCH experiments and flow experiments on a fixed-bed filtration unit containing 100 g of fresh GAC.

Results from BATCH experiments were processed by non-linear regression to describe the data by different kinetic models. The obtained kinetic parameters were applied in a dynamic model of a GAC fixed-bed filtration unit. A satisfactory agreement was found between the flow experiments and the predictions based on the data obtained from the BATCH experiments.

This work is carried out in the frame of project No. FW03010226 - Development and validation of a modular solution for WWTP outlets treatment and reuse, co-financed from the state budget by the Technology agency of the Czech Republic under the TREND 3 Programme.

6Po03
MIXED MATRIX MEMBRANES BASED ON 6FDA-BISP FOR BIOGAS PURIFICATION

Kirill Iablochkin[1], Milan Bernauer[1], Zdeněk Sofer[1], Vlastimil Fila[1]

[1]*University of Chemistry and Technology Prague, Technicka 5, 166 28 Prague 6, Czech Republic, iablochk@vscht.cz*

The membrane technology of gas separation is an alternative to conventional separation methods. The separation of CO_2 from gas mixtures is applied to processes such as the purification of biogas or the treatment of raw natural gas.

The work focuses on the preparation and characterization of a mixed matrix membranes (MMM) based on the novel polymer 6FDA-BisP and fillers such as UiO-66, ZIF-8, and MXen. Polyimides synthesized with 4,4-(Hexafluoroisopropylidene)diphtalanhydride (6FDA) have attracted the attention because of their excellent permselecitivity promoted by the presence of $–CF_3$ groups and aromatic rings. Furthermore, UiO-66, ZIF-8 and MXen particles are suitable for CO_2/CH_4 separation due to their structure. The 3D configuration of these fillers forms a high internal free volume that improves membrane permeability.

The mass content and type of inorganic fillers are investigated to determine the separation characteristics and morphology of the prepared membranes. The permeation measurement of the membrane separation efficiency was carried out at different pressures (2, 4, 6 and 8 Bar) using a model gas mixture with different ratios of CO_2/CH_4 (1/1, 3/1, 1/3). In addition, XRD, BET, FTIR, TGA, DSC, SEM and EDS have been used to characterize nanoparticles and MMMs.

6Po04
STANOVENIE ACIDITY V SYSTÉMOCH OBSAHUJÚCICH CHOLÍN CHLORID, KYSELINU MLIEČNU A DIOLY

Veronika Jančíková[1], Michal Jablonský[1]

[1]*Slovenská Technická Univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav prírodných a syntetických polymérov, Oddelenie dreva, celulózy a papiera, Radlinského 9 , 812 37 Bratislava, Slovenská republika, nikus.jancik@gmail.com*

Fyzikálno-chemické vlastnosti rozpúšťadiel patria medzi štandardné vlastnosti, ktoré sa používajú na charakterizáciu rozpúšťadiel v rôznych oblastiach. Oblasť použitia hlboko eutektických rozpúšťadiel (DES), prírodných hlboko eutektických rozpúšťadiel (NADES), zmesí s nízkou teplotou prechodu (LTTM), zmesí s nízkou teplotou topenia (LMM) alebo jednoducho zmesí podobných hlboko eutektických rozpúšťadlám (zmesi podobné DES) nie je výnimkou. Výber rozpúšťadla hrá dôležitú úlohu v procesoch zelenej chémie. Rozpúšťadlá majú vplyv na životné prostredie, náklady na procesy a bezpečnosť ľudí. Na dosiahnutie trvalo udržateľného životného prostredia je dôležité vybrať zelené médiá, ktoré spĺňajú štandardné kritériá v zelenej chémii a technológii, to znamená, že sú netoxické, environmentálne prijateľné a biokompatibilné. Medzi unikátne a typy rozpúšťadiel patria zmesi podobné DES, ktoré svojimi významnými fyzikálno-chemickými vlastnosťami, ako je udržateľnosť a biologická odbúrateľnosť pritiahli širokú pozornosť vedeckej komunity. Medzi najdôležitejšie fyzikálne vlastnosti zmesí podobných DES patrí kyslosť a zásaditosť, ktorá určuje ich použiteľnosť v rôznych priemyselných odvetviach. Kyslosť/zásaditosť rozpúšťadiel je parameter, ktorý ovplyvňuje ich aplikáciu a zároveň je základnou vlastnosťou rozpúšťadiel alebo systémov. Cieľom tejto práce bolo stanoviť kyslosť titráciou zmesí podobných DES zložených z cholín chloridu, z kyseliny mliečnej a diolov v rôznych molárnych pomeroch a vyjadriť túto nameranú vlastnosť pomocou miliekvivalentov kyselín na kilogram rozpúšťadla.

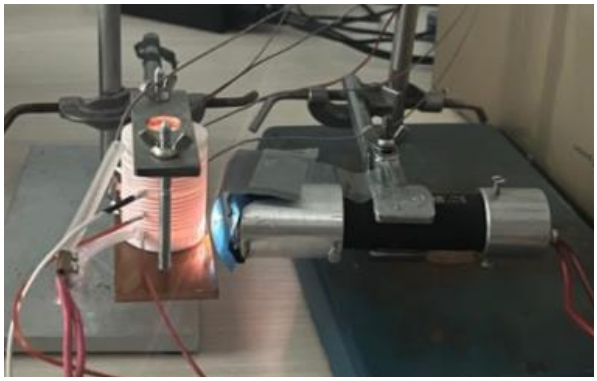
[1] Jablonský M., Jančíková V.: *Biointerface Res. Appl. Chem*. 167, 13 (2022).
[2] Jablonský M., Jančíková V., Šima J., Jablonský J.: *Energies* 9333, 15 (2022).
[3] Jablonský M., Jančíková V..: *J. Mol. Liq*. 121731, 380 (2023).

6Po05
ŠTÚDIUM MIKROŠTRUKTURÁLNYCH VLASTNOSTÍ VYTVRDENÉHO BISFENOLU A DIGLYCIDYLÉTERU POMOCOU FRONTÁLNEJ POLYMERIZÁCIE

David Pavel Královič[1], Katarína Cifraničová[1], Ondrej Šauša[1,2], Helena Švajdlenková[1,3]

[1]Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra jadrovej chémie, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovenská republika, david.kralovic1996@gmail.com
[2]Slovenská akadémia vied, Fyzikálny ústav, Oddelenie jadrovej fyziky, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovenská republika
[3]Slovenská akadémia vied, Ústav polymérov, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovenská republika

Táto práca sa zaoberá štúdiom voľnoobjemových vlastností epoxidu BADGE (bisfenol A diglycidyl éter) [1] pomocou pozitrónovej anihilačnej spektroskopie (PALS). BADGE bol pripravený frontálnou polymerizáciou. Bol pozorovaný priebeh frontálnej fotopolymerizácie iniciovanej teplom a svetlom u skúmanej vzorky a následne boli stanovené veľkosti lokálnych voľných objemov v takto vytvrdenej vzorke. Boli stanovené rýchlosti šírenia frontu v troch rôznych reakčných zónach - 2 mm od steny, 4 mm od steny a v strede reakčného valca. Následne bola technikou PALS stanovená veľkosť lokálnych voľných objemov vo finálne vytvrdenej vzorke. Na odhad veľkosti jednotlivých voľných objemov v týchto maticiach bol použitý semiempirický kvantovo-mechanický model Tao-Eldrup. Výsledky tejto práce môžu slúžiť ako východisko pre ďalší výskum a vývoj v oblasti epoxidových polymérov a súvisiacich materiálov.



Obr. 1 Priebeh frontálnej polymerizácie BADGE.

Autori ďakujú agentúre APVV za podporu financovania výskumu (grant č. APVV-21-0335).

[1] M. Herman (2013), Epoxy Resins, Encyclopedia of Polymer Science and Technology, ISBN 9780470073698.

6Po06
DEGRADATION OF TEXTILE DYES FROM WASTEWATER BY OXIDATION PROCESSES

Olga Krupková[1], Libor Dušek[1]

[1]Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Studentská 95, 532 10 Pardubice, olga.krupkova@student.upce.cz

This work deals with the degradation of textile dyes in aqueous solutions using advanced oxidation processes, where dyes like Acid Blue 80. Acid Green 25 and Reactive Blue 49 were used for degradation. They are anthraquinone dyes used for dyeing wool, nylon and polyacrylonitrile. The resistance of these dyes to biological degradation is high, therefore, advanced oxidation processes (AOP) must be used. Solutions of model dyes were decolorized using systems UV-C, UV-C/H_2O_2 and using the photo-Fenton reaction. In the UV-C and UV-C/H_2O_2 systems, the dyes were degraded in the pH range 3-11 and for the photo-Fenton reaction, the pH varied in the smaller range of 3-7. At higher pH already kinetic measurements for the photo-Fenton reaction were no longer possible due to inhomogeneity of the measured reaction mixtures. Kinetic experiments were carried out in a 10% molar excess of hydrogen peroxide,necessary for the overall mineralization of model dyes and at the same time the molar ratio of hydrogen peroxide to Fe^{2+} ions during photo-Fenton reactions was always 10:1 [1, 2].

This work was supported by the Student Grant Competition 2023 (SGS_2023_002).

[1] Kuchtová G., Chýlková J., Váňa J., Vojs M., Dušek L..: *J. Electroanal. Chem.*, 863 (2020).
[2] Palarčík J., Krupková O., Peroutková P., Malaťák J., Velebil J., Chýlková J., Dušek L.: *Catalysts*, 12(6), 644 (2022).

6Po07
VYUŽITIE ZHÁŠAČOV K CHARAKTERIZÁCII ELEKTRÓD

Gabriela Kuchtová

Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Studentská 95, 532 10 Pardubice, gabriela.kuchtova@upce.cz

Na identifikáciu reaktívnych činidiel vznikajúcich na povrchu bórom dopovanej diamantovej elektródy (BDDE), vrátane tých oxidačných, sa bežne používa zhášanie [1]. Stupeň inhibície reakcie prídavkom zhášača je možné využiť na vyhodnotenie príspevku príslušných reaktívnych

druhov pri degradácii organických látok. Znamená to, že čím vyššia je inhibícia, tým sa činidlo uplatňuje v reakcii vo väčšej miere. Najlepšie sú popísané systémy na selektívne zhášanie radikálov v prostredí síranov. Metanol a etanol sa využívajú jednak na vychytávanie síranových, jednak hydroxylových radikálov. Na selektívne zhášanie hydroxylových radikálov sa používa t-butanol [2]. V prítomnosti chloridov reaguje aj so vznikajúcimi chloridovými radikálmi [3]. Je vhodné otestovať rôzne koncentrácie zhášača, na nájdenie takej, ktorá skutočne pokryje vychytanie všetkých cieľových radikálov. Z tohto dôvodu bolo do pracovného elektrolytu s obsahom síranov a modelovým organickým polutantom pridané rôzne množstvo vybraných zhášačov. Mohlo tak dôjsť k nájdeniu oxidačného činidla, ktoré sa považuje za najúčinnejšie z hľadiska degradácie modelového polutantu. K zabrzdeniu reakcie dochádzalo v rôznej miere, čo poukazovalo na odpovedajúce vychytanie generovaných radikálov prítomným zhášačom a prispelo k charakterizácii testovanej elektródy.

[1] Wang L., Lan X., Peng W., Wang Z.: Journal of Hazardous Materials, 408 (2021).
[2] Xie J., Zhang C., Waite T. D.: Water Research, 217 (2022).
[3] Yang Y., Ramos N. C., Clark J. A., Hillhouse H. W.: Water Research, 221 (2022).

6Po08
ŠTÚDIUM EKOTOXICITY XENOBIOTÍK NA VYBRANÝCH RIASACH A KÔROVCOCH

Miloš Lukáč[1], Martin Bajcura[1], Martin Pisárčik[1]

[1]Farmaceutická fakulta UK v Bratislave. Katedra chemickej teórie liečiv, Kalinčiakova 8, 832 32 Bratislava, lukac@fpharm.uniba.sk

Vplyv xenobiotík na životné prostredie je možné skúmať prostredníctvom rôznych rastlinných a živočíšnych modelov. Ekotoxikológia za týmto účelom často používa vodné organizmy, keďže mnohé z cudzorodých látok sa akumulujú vo vodnom prostredí. Nariadenie Európskeho parlamentu a Rady (ES) č. 1907/2006 (REACH) [1] vyžaduje údaje hlavne o akútnej a chronickej toxicite zlúčenín na rybách, kôrovcoch, riasach a iných vodných rastlinách. V rámci nášho výskumu sme sa zamerali na štúdium rôznych organizmov ako potenciálnych rastlinných a živočíšnych modelov použiteľných v ekotoxi–kologických testoch. Rastlinné organizmy predstavovali druhy z čeľadí Volvocidae, Scenedesmaceae a Euglenaceae. Zástupcovia z čeľadí Daphniidae, Mysidae, Triopsidae, Branchipodidae a Lepthesteriidae reprezentovali širokú paletu kôrovcov. Experimenty sme uskutočnili v modifikovanom médiu COMBO [2], ktoré slúžilo na kultiváciu všetkých skúmaných organizmov. Roztok obsahoval zmes anorganických zlúčenín zahŕňajúcich 25 prvkov a bol doplnený o vitamíny B1, B7 a B12. Dvojchróman draselný sme použili ako štandardnú porovnávaciu zlúčeninu, ktorá vyjadrovala citlivosť skúmaných organizmov v rámci ekotoxikologických testov.

Práca vznikla s podporou grantu VEGA 1/0686/21.

[1] Nariadenie Európskeho parlamentu a Rady (ES) č. 1907/2006
[2] Kilham S. S., Kreeger D. A., Lynn S. G., Goulden C. E., Herrera L.: *Hydrobiologia 377*, 147 (1998).

6Po09
DEVELOPMENT OF FILAMENTS FOR FDM 3D PRINTING OF ORAL SOLID DOSAGE FORMS

Jana Macháčková, Marie Nevyhoštěná, Kevin Matzick, Alena Komersová

Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice 2, Czech Republic, jana.machackova3@student.upce.cz

Fused Deposition Modeling (FDM) 3D printing technology finds new applications across fields. It allows easy transfer of a digital model to a 3D object, is suitable for small-scale production and has the potential for the preparation of personalized dosage forms. The main advantage of FDM 3D printing is its flexibility. A computer-aided design (CAD) model can be edited immediately as needed, and products from various materials can be created in a relatively short time if a suitable feedstock is available in the form of thermoplastic filament [1]. In the printing of oral dosage forms, a key obstacle is the lack of suitable filaments meeting the safety criteria for human administration [2]. Our research group is dealing with this problem. We use hot-melt extrusion for the preparation of filaments based on biopolymers, investigate their properties and test their application in the printing of solid drug forms. We aim at the preparation of controlled-release products. Therefore, we also study the dissolution properties of the products and the kinetics and mechanism of drug release. In the presented work, we mainly focus on the possibility of processing various pharmaceutical-grade ingredients into a filament of constant diameter and parameters suitable for 3D printing.

The authors thank for financial support of the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (project SGS 2023 008), and Colorcon, which supplied the samples of AFFINISOLTM 15 LV.

[1] Dumpa, N., Butreddy, A., Wang, H., Komanduri, N., Bandari, S., Repka, M.: International Journal of Pharmaceutics. 600, 120501 (2021).
[2] Oladeji S., Mohylyuk V., Jones D. S., Andrews G. P.: International Journal of Pharmaceutics. 616, 121553 (2022).

6Po10
ANTROPOGENNÍ GADOLINIUM VSTUPUJÍCÍ DO POTRAVNÍHO REŤEZCE

Frederika Mišíková[1], Anna Krejčová[1], Jan Patočka[2]

[1]*Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika, frederika.misikova@student.upce.cz*
[2]*Katedra analytické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika*

Gadolinium je jeden ze 17 prvků vzácných zemin (REE) [1] a v dnešní době je považováno za potencionálně možný kontaminant životního prostředí. Z důvodu jeho rozšířeného použití v mnoha odvětvích průmyslu, medicíně i zemědělství [1, 2] se dostává do životního prostředí v chemických formách, ve kterých se běžně nevyskytuje [1-3]. Zde antropogenní Gd způsobuje obohacení oproti přirozenému obsahu a také oproti koncentracím ostatních REE [1, 3]. Tento fenomén byl poprvé popsán v 80. letech 20. století a pojmenován gadoliniová anomálie s prahovou hodnotou 1,5 [3].

Studie měla za cíl sledovat množství gadolinia antropogenního původu přítomného v potravinách pro běžnou konzumaci, jako jsou mouka, rýže, mrkev a následně vyhodnotit gadoliniovou anomálii. Byla provedená prvková analýza vybraných REE (Ce, Dy, Er, Eu, Gd, Ho, La, Lu, Nd, Pr, Sm, Tb, Tm, Y, Yb) za využití hmotnostní spektrometrie s ionizací v indukčně vázaném plazmatu. Před analýzou byly vzorky rozloženy v mikrovlnné zařízení v prostředí rozkladných činidel, a to podvarové 65% HNO_3 a 30% H_2O_2. Ve vzorcích potravin byla potvrzena přítomnost antropogenního Gd a zjištěna pozitivní gadoliniová anomálie.

Práce vznikla za podpory studentského grantu SGS_2023_002 „Výzkum pokročilých metod a procesů environmentální chemie a inženýrství a udržitelného a regenerativního rozvoje podniků“. Poděkování patří také všem zúčastněným za odebrané vzorky potravin.

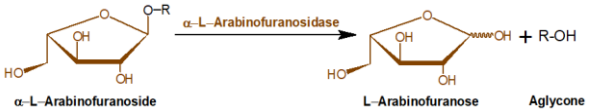
[1] Zare-Dorabei R., Norouzi P., Ganjali M.R.: *J. Hazard. Mater. 171*, 1-3 (2009).
[2] Zamani H.A., Rajabzadeh G., Ganjali M.R., Norouzi P.: *Anal. Chim. Acta. 598*, 1 (2007).
[3] Bendakovská L., Krejčová A., Černohorský T., Zelenková J.: *Chem. Pap. 70*, 9 (2016).

6Po11
RELATIONSHIP BETWEEN THE STRUCTURE-BASED CLASSIFICATION AND SUBSTRATE SPECIFICITY OF α-L-ARABINOFURANOSIDASES

Walid Moussa[1], Vladimír Puchart[1]

[1]*Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, chemwali@savba.sk*

α-L-Arabinofuranosidases (EC 3.2.1.55) release the terminal non-reducing-end α-L-arabinofuranosyl residues from α-L-arabinosides.



These enzymes are grouped to glycoside hydrolase families 43, 51, 54 and 62 in Carbohydrate Active enZymes database [1, 2]. We examined the catalytic activity and specificity of 34 α-L-arabinofuranosidases classified into GH43 (14 subfamilies), GH51 and GH62 families in order to reveal the structure-function relationship of these diverse enzymes.

Arabinofuranosidase activity strongly depended on the substrate. None of the eznymes was able to efficiently liberate arabinose from all three polymers used. Debranched arabinan hydrolyzing enzymes, found in GH62 and GH51 families and only in GH43_26 subfamily, were also active on linear arabinooligosaccharides. The activity on branched arabinan, usually accompanied with short arabinooligosaccharides debranching, was found also in some GH62 and GH51 representatives, however, is rare among GH43 enzymes. Dearabinosylation of arabinoxylan was more frequent among GH43 members and relatively less frequent in GH51 enzymes, and ususally coincided with the dearabinosylation of arabinoxylooligosaccharides. There is a strict separation of the regiospecificity between the enzymes debranching singly arabinosylated (AXH-m) and doubly 2,3-arabinosylated (AXH-d3) xylopyranosyl residues. In some cases the AXH-m enzymes showed a somewhat relaxed regiospecificity exhibiting also AXH-d3 activity,

albeit only towards the substrates diarabinosylated at the non-reducing-end xylopyranosyl residues.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the Contract no. APVV-20-0591, and by Scientific Grant Agency under the contract no. 2/0171/22.

[1] Drula E., Garron M.-L., Dogan S., Lombard V., et al.: Nucleic Acids Res. 50, D571 (2022).
[2] Lagaert S., Pollet A., Courtin C. M., Volckaert G.: Biotechnol. Adv. 32, 316 (2014).

6Po12
ROOM TEMPERATURE SYNTHESIS AND AMINE-FUNCTIONALIZATION OF ZIF-8 FOR ENHANCED CO_2 CAPTURE

Viktorie Neubertová[1], Václav Švorčík[2], Zdeňka Kolská[1]

[1]*Centre for Nanomaterials and Biotechnology, Faculty of Science, J. E. Purkyně University, Pasteurova 15, 40096 Ústí nad Labem, Czech Republic, viki.kivi21@gmail.com*
[2]*Department of Solid State Engineering, University of Chemistry and Technology, 166 28 Prague 6, Czech Republic*

The urgent need to mitigate increasing atmospheric CO_2 levels requires efficient approaches [1, 2]. This study focuses on enhancing the CO_2 capture capacity of the metal-organic framework (MOF) ZIF-8 through a room temperature synthesis and amine-functionalization. We investigated the impact of four amino-compounds: (i) tetraethylen–epentamine (TEPA), (ii) hexadecylamine (HDA), (iii) ethanolamine (ELA) or (iv) cyclopropylamine (CPA) on the chemical structure, size, surface area and porosity. Varying the concentrations of these amino-compounds revealed distinct effects. The ZIF-8 sample functionalized with the highest tested TEPA concentration exhibited a significant 33.3 % enhancement in CO_2 capture efficiency over pristine ZIF-8. Additionally, the least concentrated HDA and CPA samples showed notable improvements, with enhancements of 46.6 % and 18.6 %, respectively. These findings highlight the potential of simple synthesis and functionalization techniques for MOFs in enhancing their CO_2 capture capabilities. The study provides new opportunities for developing strategies to mitigate CO_2 emissions using MOFs. By leveraging room temperature synthesis and functionalization, these innovative approaches hold promise for advancing sustainable CO_2 capture technologies. Future research can build upon these findings to optimize MOF design and functionalization techniques for even more efficient CO_2 capture.

This work was supported by the Czech Science Foundation GAČR under project No. 23-05197S and project UJEP-SGS-2022-53-004-2.

[1] Sumida K. et al: *Chem. Rev.*, 112, 724 (2012).
[2] Mahajan S., Lahtinen M.: *J. Environ. Chem. Eng. 10*, 108930 (2022).

6Po13
DISSOLUTION TESTING OF NEW POTENTIAL DRUGS FOR ALZHEIMER'S DISEASE

Marie Nevyhoštěná[1], Alena Komersová[1], Jana Macháčková[1], Vladimír Pejchal[1], Šárka Štěpánková[1]

[1]*Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice, st54183@upce.cz*

Due to the widespread use of sulfonamides and lipids, sulfonamides have become the most commonly used antibacterial drugs of the present day, they are also featured anti-inflammatory and anticancer effects. They act like antioxidants and carbonic anhydrase inhibitors. So, they are used to treat Alzheimer's disease, a neurodegenerative disorder characterized by cognitive dysfunction and dementia. According to current estimates, around 50 million people are affected by the disease. Unfortunately, drugs for Alzheimer's disease and its progression have not yet been discovered. There are several approaches in the symptomatic treatment of this disease. Therefore, the development of new, less toxic and more effective substances is of critical importance.[1, 2]

A family of new compounds with a sulfonamide functional group were prepared by six-step synthesis. It succeeded in growing a single crystal and confirming the structure of the final substance by X-ray analysis. A biological activity assay was performed and dissolution behaviour of selected compounds was studied through hydrophilic and lipophilic matrix tablets. Some substances displayed remarkable biological activity and became a subject of interest for further extensive testing.

This work was supported by the Ministry of Education of the Czech Republic (project SGS 2023 008).

[1] Akocak S., Boga M., Lolak N., Tuneg M., Sanku R.: *J. Tur. Chem. Soc.* 63-70, 6 (2019).
[2] Liu H., Zhang B., Zhao W., Yu X., Zhu W., Xia Ch., Zhou Y.: *ACS Omega* 34796-34804, 6 (2021).

6Po14
PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE PORÉZNÍCH UHLÍKATÝCH MONOLITŮ NA BÁZI CELULÓZY

Alžběta Parchaňská[1]

[1]*Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava, alzbeta.parchanska@osu.cz*

Celulóza je nejrozšířenějším biopolymerem na zemském povrchu, ročně jí vzniká až 1,5×109 tun. Je hlavní stavební látkou rostlinných buněčných stěn, a proto je na celém světě k dispozici prakticky v neomezeném množství.

Cílem této práce je optimalizace přípravy porézních uhlíkatých monolitů obohacených částicemi kovů (železo, měď, mangan a zinek) resp. oxidy těchto kovů. Zdrojem uhlíku pro přípravu těchto monolitů je mikrokrystalická celulóza rozpuštěná ve vychlazeném roztoku hydroxidu sodného [1]. Tento postup, na rozdíl od "tradičních" způsobů rozpouštění celulózy [2], nevyžaduje její chemickou modifikaci a je proto jednodušší a šetrnější k životnímu prostředí. Zmražením roztoku celulózy vznikne celulózový gel, který je po regeneraci a vysušení pyrolyzován v inertní atmosféře.

Vlastnosti porézních uhlíkatých monolitů, zejména porozita, stupeň grafitizace uhlíku, stupeň oxidace obohacujících kovů a velikost jejich částic, jsou ovlivněny všemi kroky přípravy, zejména způsobem regenerace a teplotou pyrolýzy. Obohacování různými kovy rovněž vede k uhlíkatým monolitům s různou porozitou a stupněm grafitizace uhlíku.

Optimálně připravený porézní uhlíkatý monolit vykazuje dostatečnou mezoporozitu, která je nezbytná pro minimalizaci difúzních omezení.

Autorka děkuje za podporu poskytnutou výzkumnou infrastrukturou NanoEnviCz, podpořenou Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy České Republiky v rámci projektu LM2018124.
Autorka děkuje Mgr. Tomáši Zelenkovi, Ph.D. za měření porozity uhlíkatých monolitů.

[1] Kryeziu A. et al.: Industrial Crops & Products 183, 11 4961 (2022).
[2] Kryeziu A, Slovák V., Parchaňská A.: Polymers 14, 1621 (2022).

6Po15
HYDROPHILIC POLYMER CONJUGATES WITH OCTAHEDRAL MOLYBDENUM CLUSTERS: POTENTIAL NANOMATERIALS FOR PHOTODYNAMIC THERAPY

Michal Pechar[1], Robert Pola[1], Marina Rodrigues Tavares[1], Kaplan Kirakci[2], Tomáš Přibyl[3], Jaroslav Zelenka[3], Tomáš Ruml[3], Kamil Lang[2], Tomáš Etrych[1]

[1]*Institute of Macromolecular Chemistry of the Czech Academy of Sciences, Heyrovského náměstí 2, 162 06 Prague 6, Czech Republic, pechar@imc.cas.cz*
[2]*Institute of Inorganic Chemistry of the Czech Academy of Sciences, 250 68 Husinec-Řež 1001, Czech Republic*
[3]*Department of Biochemistry and Microbiology, University of Chemistry and Technology Prague, Technická 5, 166 28 Praha 6, Czech Republic*

Octahedral molybdenum clusters (Mo_6) have been intensively studied as photo/radiosensitizers for photodynamic therapy applications [1, 2]. However, their delivery to the desired target can be hampered by its limited solubility, low stability in physiological conditions, and inappropriate biodistribution, thus limiting the therapeutic effect and increasing the side effects of the therapy. To overcome such obstacles and to prepare photofunctional nanomaterials, we employed biocompatible and water-soluble copolymers based on *N*-(2-hydroxypropyl)–methacrylamide (pHPMA) [3] as carriers of Mo_6 clusters. The luminescent properties of Mo_6 clusters were preserved upon conjugation with the polymers; the polymer conjugates exhibited an efficient quenching of their excited states leading to production of singlet oxygen ($O_2(^1\Delta_g)$) which is crucial for a successful photodynamic treatment. The conjugates prepared by azide-alkyne cycloaddition displayed high colloidal stability in a physiological phosphate buffer in addition to high luminescence quantum yields. The illumination of HeLa cells after 24 h of incubation with polymers bearing Mo_6 caused strong phototoxic effect. While conjugation of Mo_6 to the HPMA-based copolymer only slightly increased its phototoxicity, it significantly lowered its dark toxicity allowing for a noticeably wider therapeutic window, thus diminishing side-effects during the PDT. The HPMA copolymers are suitable nanocarriers for molybdenum cluster-based photosensitizers intended for photodynamic therapy.

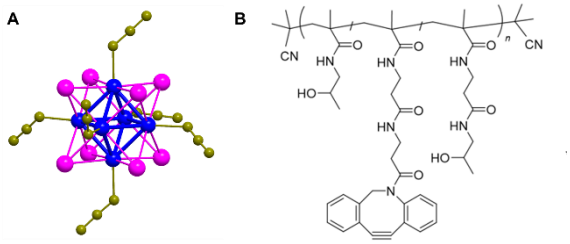


Fig. 1 Schematic representation of the molybdenum cluster complex $[Mo_6I_8(N_3)_6]^{2-}$ (**A**) and poly(HPMA-*co*-MA-*β*-Ala-DBCO) (**B**).

We gratefully acknowledge the financial support from the Czech Science Foundation (grant No. 21-11688S).

[1] Tavares M., Kirakci K., Kotov N., Pechar M., Lang K., Pola R., Etrych T.: *Nanomaterials 12*, 3350 (2022).
[2] Kirakci K., Zelenka J., Rumlová M., Cvačka J., Ruml T., Lang K.: *Biomater. Sci.*, *7*, 1386 (2019).
[3] Kopeček J., Kopečková P.: *Adv. Drug Deliv. Rev.*, *62*, 122 (2010).

6Po16
PŘÍPRAVA A HODNOCENÍ OBALOVACÍCH SMĚSÍ PRO SUCHÉ OBALOVÁNÍ LÉKOVÝCH MIKROFOREM S ŘÍZENÝM UVOLŇOVÁNÍM

Lucie Sedláčková[1], Aleš Franc[1], Sylvie Pavloková[1]

[1]*Masarykova univerzita, Farmaceutická fakulta, Ústav farmaceutické technologie, Palackého tř. 1946, 612 00 Brno, 507216@muni.cz*

Suché obalování patří v současné době mezi přijatelné alternativy, zlevňující a zjednodušující klasickou proceduru s použitím kapalného dispergantu. Výhodně se nabízí metoda, kdy membrána není vytvářena odpařováním kapaliny, ale tavením filmotvorné směsi. K tomu je možné využít pevnou disperzi s obsahem filmotvorné látky a látky s nízkou teplotou tání, kam patří např. vosky. Touto binární směsí v pevném stavu jsou jádra nejprve obalena, přičemž směs pouze adheruje na jejich povrch. Poté se za zvýšené teploty vytváří monodisperzní film, který umožní řízené uvolňování látky obsažené v jádru. Výhodně je možné použít teploty, při které zároveň dochází ke skelovatění použité filmotvorné látky [1].

Byly připraveny obalové směsi sestávající z látky s nízkou teplotou tání ze skupiny vosků (Bonuwax®, Biogrund, Německo) a polymeru, zajišťujícího prodloužené či zpožděné uvolňování modelových látek (Eudragit® L, S, RL, RS, Evonik Industries, Německo či Ethocel™, Colorcon, USA) ve třech poměrech (1:1, 1:3 a 3:1).

Obalové směsi byly hodnoceny z hlediska běžných fyzikálních charakteristik. Sledována byla jejich velikost a morfologie. Směsi s optimálními vlastnostmi budou použity na obalení jader s již ověřeným složením (pelety či minitablety), přičemž vedle běžných fyzikálních vlastností bude metodou disoluce sledována kinetika uvolňování [2, 3].

Práce vznikla za podpory MŠMT v rámci Specifického vysokoškolského výzkumu (projekt MUNI/A/1108/2022).

[1] Garajova, M., Franc, A., et al.: *Chem. Listy 114(1)*, 34-40 (2020).
[2] Gupta, S., Thool, P., et al.: *Int. J. Pharm 587*, 119571 (2020).
[3] Neumann, D., Muselik, J., et al.: *Biopharm. Drug Dispos. 38(8)*, 458-463 (2017).

6Po17
FLUORESCENT NANODIAMONDS MODIFIED WITH HYALURONIC ACID FOR TARGETED CANCER CELL THERANOSTICS

Hana Španielová[1], Jitka Neburková[1], Jan Bartoň, Petr Cígler[1]

[1]*Institute of Organic Chemistry and Biochemistry of the Czech Academy of Sciences, Flemingovo náměstí 542/2, 160 00 Praha 6, Czech Republic, hana.spanielova @uochb.cas.cz*

Fluorescent nanodiamonds (FND) can be used as drug carriers and biosensing agents in nanomedicine. We investigated whether hyaluronic acid (HA) could be used to target FNDs to CD44 receptors, which are important biomarkers for cancer stem cells. FNDs were coated with a thin silica layer bearing an alkyne-modified poly(2-hydroxypropyl) methacrylamide (HPMA) coating. The conjugation strategy for HA (~15 kDa) was based on a reactive, fluorescently labeled heterobifunctional linker containing azide group (for attachment to the FNDs), reactive aminooxy group (for conjugation to aldehyde group on HA disaccharide), and a fluorescent probe (Bodipy). We tested the FND-HA system on MDA-MB-231 human breast tumor cells with a high density of CD44 receptors. Confocal microscopy and flow cytometry were used to verify the targeting properties of FND with HA. The results of our study indicate that FNDs coated with HA have some degree of selectivity when interacting with CD44-expressing cells, but the targeting efficiency of HA is not as high as that of other tight-binding ligands observed in our previous studies [1, 2].

[1] J. Neburkova *et al.*, in *Integrin Targeting Sy*stems for Tumor Diagnosis and Therapy, Springer, New York, NY, 2018), pp. 169–189.
[2] J. Neburkova et al., Mol. Pharm. 15, 2932−2945 (2018).

6Po18
3D TISK INDIVIDUALIZOVANÉ LÉKOVÉ FORMY

Martin Veselý[1], Jan Elbl[1], David Záruba[1]

[1]*Ústav farmaceutické technologie, Farmaceutická fakulta, Masarykova univerzita, Palackého třída 1946/1, 612 00 Brno, 460848@muni.cz*

3D tisk je v posledních letech poměrně rychle se rozvíjející metodou přípravy různých lékových forem. Jsou dokumentovány úspěšné případy přípravy tablet či orodispergovatelných filmů. Hlavní výhodou této metody je především možnost volby velikosti či tvaru dané lékové formy a mimoto i druh a množství pomocných a léčivých látek. Z toho profitují především specifické skupiny pacientů, jež jsou svými potřebami odlišné od většiny pacientů. Jmenovitě se jedná například o pacienty pediatrické či geriatrické [1, 2].

Cílem výzkumného projektu je příprava individualizované žvýkatelné lékové formy pro pediatrické pacienty pomocí SSE 3D tisku ve vhodném tvaru, velikosti a o vhodné chuti, neboť právě tyto parametry bývají klíčové pro dobrou compliance pediatrických pacientů [1]. Pozornost je též věnována mechanickým vlastnostem kritickým pro manipulaci s lékovou formou. Využito je především přírodních polymerů, plastifikátorů, zahušťovadel či sladidel.

[1] Seoane-Viaño, I., et al. Semi-solid extrusion 3D printing in drug delivery and biomedicine: Personalised solutions for healthcare challenges. Journal of Controlled Release, 2021, 332: 367-389.
[2] Johannesson, J, et al. 3D-printing of solid lipid tablets from emulsion gels. International journal of pharmaceutics, 2021, 597: 120304.

6Po19
SEPARACE VYBRANÝCH MIKROPOLUTANTŮ Z VODY S RŮZNOU SOLNOSTÍ POMOCÍ NANOFILTRACE

Martin Zlámal[1], Karel Pecha[1], Zoran Zwaan[1]

[1]*Vysoká škola chemicko-Technologická v Praze, Ústav anorganické technologie, Technická 5, 166 28 Praha 6, zlamalm@vscht.cz*

Kontaminace odpadních vod mikropolutanty, tedy antropogenními látkami znečišťujícími prostředí, jejichž koncentrace je na úrovni mikrogramů až nanogramů na litr je v oblasti recyklace odpadních vod závažným problémem. Ať už se jedná o biologicky či jinak odbouratelné látky nebo perzistentní polutanty, je pro rozšíření možností využití různých typů odpadních vod nutné tyto látky z vody odstraňovat. Vhodnou metodou může být koncová separace pomocí membránové technologie jako je např. nanofiltrace. Produktem je permeát s podstatně nižší koncentrací polutantů.. V retentátu se jejich koncentrace naopak zvyšuje a je pak možno je účinněji odstraňovat např. adsorpcí na aktivním uhlí, či pomocí různých pokročilých oxidačních procesů. V případě odpadních vod lze počítat s vyšší solností vody způsobenou rozpustnými anorganickými solemi, která může výrazně ovlivnit separační schopnosti membrány. Tato práce se zabývá studiem separačních vlastností nanofiltrační membrány vůči různým polutantům jako jsou např. umělá sladidla Acesulfam-K a Sacharin, selektivní herbicid Glyfosát či analgetikum Ibuprofen ve vodách s různou solností. Pro ověření separačních schopností byly pro vlastní experimenty použity zvýšené koncentrace polutantů v řádu stovek a desítek mg/l umožňující detekci pomocí iontové a vysokotlaké kapalinové chromatografie. Byly vyhodnoceny vlivy koncentrace a typ přítomných anorganických solí na permeabilitu jednotlivých mikropolutantů při různých zvolených parametrech nanofiltrace.

Tato práce byla realizována v rámci projektu FW03010226 - Vývoj a validace modulárního řešení pro dočištění a recyklace odtoků ČOV, financovaného se státní podporou Technologické agentury ČR a Ministerstva průmyslu a obchodu ČR v rámci Programu TREND.

6Po20
FAST SURFACE HYDROPHILIZATION VIA ATMOSPHERIC PRESSURE PLASMA POLYMERIZATION FOR BIOLOGICAL AND TECHNICAL APPLICATIONS

Hana Dvořáková, Jan Čech, Monika Stupavská, Lubomír Prokeš, Jana Jurmanová, Vilma Buršíková, Jozef Ráheľ, Pavel Sťahel

Department of Physical Electronics, Faculty of Science, Masaryk University, Kotlarska 2, Brno, 611 37, Czech Republic

Polymeric surfaces can benefit from functional modifications prior to using them for biological and/or technical applications. Surfaces considered for biocompatibility studies can be modified to gain beneficiary hydrophilic properties. For such modifications, the preparation of highly

hydrophilic surfaces by means of plasma polymerization can be a good alternative to classical wet chemistry or plasma activation in simple atomic or molecular gasses. Atmospheric pressure plasma polymerization makes possible rapid, simple, and time-stable hydrophilic surface preparation, regardless of the type and properties of the material whose surface is to be modified. In this work, the surface of polypropylene was coated with a thin nanolayer of plasma-polymer which was prepared from a low-concentration mixture of propane-butane in nitrogen using atmospheric pressure plasma. A deposition time of only 1 second was necessary to achieve satisfactory hydrophilic properties. Highly hydrophilic, stable surfaces were obtained when the deposition time was 10 seconds. The thin layers of the prepared plasma-polymer exhibit highly stable wetting properties, they are smooth, homogeneous, flexible, and have good adhesion to the surface of polypropylene substrates. Moreover, they are constituted from essential elements only (C, H, N, O). This makes the presented modified plasma-polymer surfaces interesting for further studies in biological and/or technical applications.

POSTERY - SEKCIA 7
CHEMPROGRESS - CHEMICKÉ TECHNOLÓGIE

7Po01
MATEMATICKÉ MODELOVÁNÍ VLIVU GEOMETRIE KANÁLU PRO PROUDĚNÍ PLYNŮ LISOVANÝCH KOVOVÝCH BIPOLÁRNÍCH DESEK NA VÝKON PEM PALIVOVÉHO ČLÁNKU

Miroslav Hala[1], Roman Kodým[1], Martin Prokop[1], Martin Paidar[1], Karel Bouzek[1]

[1]Ústav anorganické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6 – Dejvice, kodymr@vscht.cz.

Vodíkové palivové články s protonově vodivou membránou (PEMFC) představují základní článek trvale udržitelné vodíkové ekonomiky. Jedná se o zařízení umožňující přeměnu chemické energie vodíku na energii elektrickou s vysokou účinností při relativně nízkých teplotách. Základním konstrukčním prvkem PEMFC jsou bipolární desky (BP) zajištující elektrické propojení jednotlivých článků ve svazku a rovnoměrný rozvod plynů v aktivní ploše. Tradičně jsou kanálky pro rozvod plynů v grafitové nebo kompozitní BP vyráběny frézováním, což předurčuje pravoúhlou geometrii průřezu kanálků. V současné době se však výzkum zaměřuje na vývoj tenkých kovových BP s kanálky vytvořenými lisováním. Tyto BP mají oproti tradičním materiálům řadu výhod: vyšší elektrickou vodivost, nižší hmotnost a efektivnější výrobní proces. Vzhledem k povaze výroby kovových BP je však třeba zvážit nové geometrie kanálů, s nimiž je zatím obecná zkušenost nedostatečná, zejména pokud jde o vliv geometrie lisovaných kanálků na jejich schopnost distribuovat reakční plyny a odvádět generované teplo a kapalnou vodu. V rámci této práce bylo použito matematické modelování pro analýzu vlivu tvaru lisovaných kanálků na výkon PEM FC. Byl navržen troj-rozměrný, izotermní, stacionární „continuum-mechanics“ model řešený metodou konečný prvků v programu COMSOL. Z výpočtů byly navrženy intervaly optimální geometrie kanálu, což přispívá k rychlejšímu vývoji a komercializaci nových BP.

Projekt financován z dotačního programu KAPPA pro aplikovaný výzkum, experimentální vývoj a inovace provozovaného Technologickou agenturou ČR a z EEA fondů Norska (projekt akronym CORE, č. TO01000306).

7Po02
LIKVIDACE ODPADŮ Z VÝROBY TŘASKAVIN

Libor Mastný[1], Miloslav Lhotka[2]

[1]VŠCHT Praha, Ústav anorganické chemie, Technická 5, 166 28 Praha 6, mastnyl@vscht.cz
[2]VŠCHT Praha, Ústav anorganické technologie, Technická 5, 166 28 Praha 6

Současná evropská legislativa REACH zařazením vybraných látek do skupiny SVHC (a následně do přílohy XIV Nařízení EP a Rady č. 1907/2006) významným způsobem omezuje možnosti používání chemikálií na bázi olovnatých iontů. Přesto někteří výrobci tyto třaskaviny stále vyrábějí. Současně je třeba si uvědomit, že při jejich likvidaci je rozhodujícím krokem rozklad aniontové části. Z tohto důvodu lze navržené postupy aplikovat i na „bezolovnaté“ třaskaviny.

V průmyslu se stále ve větší míře využívá k likvidaci anorganických i organických látek popř. živých organismů silných oxidačních účinků oxidu chloričitého. Ten se vyrábí in situ, odpadá tak nebezpečí přepravy toxické látky. Další nespornou výhodou při likvidaci je absence vzniku chlorovaných aromatických uhlovodíků, kterým se nelze vyhnout při oxidaci plynným chlorem. K testům zapůjčila firma Envicomp, s.r.o. generátor oxidu chloričitého LOTUS MINI. Testovanými vzorky třaskavin byly azid a trinitroresorconát (styfnát) olovnatý. V práci byl sledován vliv hodnoty pH zpracovávané suspenze a optimalizace přídavku roztoku oxidu chloričitého na úplný rozklad aniontové části obou třaskavin.

Ze získaných výsledků je zřejmé, že roztokem oxidu chloričitého lze při nízké hodnotě pH a optimálně vyšší teplotě zlikvidovat pevné odpady a odpadní vody z výroby obou předmětných třaskavin.

7Po03
STUDIUM OXIDACE ŽELEZNATÝCH IONTŮ VZDUCHEM

Ivona Sedlářová[1], Petr Lodňánek[1], Martin Zlámal[1], Jan Vídenský[1]

[1]VŠCHT, Ústav anorganické technologie, Technická 5, 166 28 Praha, ivona.sedlarova@vscht.cz

Předložený příspěvek se zabývá popisem oxidace vodného roztoku síranu železnatého vzduchem v neutrální a slabě zásadité oblasti. Byla provedena série experimentů, kdy byl při konstantním pH a průtoku vzduchu sledován vliv počáteční koncentrace Fe^{2+} iontů v roztoku, pH a

teploty na průběh oxidace, celkovou dobu reakce a charakter finálních produktů. Experimenty byly prováděny v izotermním polovsádkovém míchaném reaktoru, ve kterém byl roztok síranu železnatého probubláván vzduchem. Konstantní pH zabezpečoval pH-stat průběžnými přídavky neutralizačního činidla - roztoku hydroxidu sodného. Z křivek spotřeby neutralizačního činidla byl posouzen pravděpodobný reakční mechanismus a určena celková doba reakce. Pevné produkty oxidace byly analyzovány pomocí XRD, SEM, Ramanovy spektroskopie a laserové difrakční analýzy. Bylo zjištěno, že rychlost oxidace významně závisí na přestupu kyslíku z bublin vzduchu do reakční směsi. Dále z experimentů vyplynulo, že pH i teplota mají vliv jak na průběh reakce, tak charakter finálních produktů. Mezi finálními produkty bylo možno nalézt α-FeOOH (goethit), γ-FeOOH (lepidokrokit) a Fe_3O_4 (magnetit). Střední velikost částic pevných produktů se v závislosti na podmínkách reakce pohybovala v rozmezí přibližně od 3 do 8 μm.

7Po04
ŽELEZANY – ELEKTROCHEMICKÁ PRÍPRAVA

Renáta Števuľová, Kamil Kerekeš, Ján Híveš

Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU v Bratislave, Oddelenie anorganickej technológie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, renata.stevulova@stuba.sk

Železany sú veľmi perspektívne „zelené“ oxidanty vhodné na dočisťovanie odpadových vôd. Dokážu oxidovať škodlivé zložky v odpadových vodách, ako sú napríklad antibiotiká, hormóny alebo zvyšky liekov, ktoré predstavujú hrozbu pre životné prostredie. Je možné ich aj používať ako dezinfekčné prostriedky pri úprave pitnej vody. Z ekonomického hľadiska ide o drahšiu chemikáliu, ale jej cenu vyvažuje jej veľká účinnosť. Problémom môže byť aj jej stabilita, ktorá je silne previazaná s čistotou produktu, ktorý dokážeme pripraviť v tuhom stave [1, 2].

Náš výskum sa zameriava najmä na elektrochemickú prípravu železanu draselného a optimalizáciu výrobného procesu. Výroba železanov je závislá od viacerých parametrov, ktoré môžu zásadne ovplyvniť celý proces prípravy. Týmito dôležitými parametrami sú: teplota, koncentrácia elektrolytu, typ elektrolytu, zloženie anódy, čas elektrolýzy a prítomnosť nečistôt.

Predmetom tejto práce je elektrochemická oxidácia železa v roztoku NaOH. Elektródy, ktoré si pripravujeme, obsahujú okrem hlavnej zložky-železa aj legujúce prvky. Z doterajších výskumov sa zistilo, že ako najvhodnejšie legujúce prvky sú kremík a hliník. Optimalizovalo sa zloženie pripravovaných zliatin železa, pretože tento parameter má aj najväčší vplyv na výslednú účinnosť elektrochemického procesu.

V našom príspevku predstavíme najnovšie výsledky z elektrochemickej prípravy železanu z hľadiska spôsobu prípravy, prúdovej účinnosti, výťažku procesu a čistoty finálneho produktu.

Táto práca vznikla s podporou MŠVVaŠ SR prostredníctvom projektu VEGA 1/0436/23.

[1] Híveš J., Kerekeš K. Elektrolyzér na elektrochemickú prípravu železanov a spôsob prípravy železanov. Úžitkový vzor č. 8530, 2019.
[2] Kerekeš K. Štúdium prípravy železanov, Dizertačná práca, 2016.

7Po05
PULZNÁ LASEROVÁ DEPOZÍCIA KOVOVÝCH VRSTIEV

Jaroslav Bruncko[1], Katarína Koťuhová[2], Miroslav Michalka[1], Monika Jerigová[1,2]

[1]*Medzinárodné laserové centrum CVTI, Lamačská cesta 8A, PO Box 47, 840 05 Bratislava, jaroslav.bruncko@cvtisr.sk*
[2]*Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského v Bratislave, Ilkovičova 6, Mlynská dolina, 84215, Bratislava*

Pulzná laserová depozícia (PLD) predstavuje depozičnú technológiu, ktorá so svojimi princípmi vývoja pár deponovanej vrstvy patrí medzi techniky všeobecne nazývané fyzikálna depozícia z pár (PVD). Intenzívny laserový impulz s dostatočnou výkonovou hustotou dokáže lokálne ohriať a odpariť zdrojový materiál (terč) požadovaného chemického zloženia – v našom prípade kov. Expandujúce pary (ablačný prúd) sa šíria kolmo na povrch terča a po dosiahnutí povrchu substrátu sa usádzajú v podobe tenkej vrstvy, pričom v závislosti od termodynamických pomerov často lokálne migrujú do podoby rôznych zhlukov na povrchu substrátu, ktoré ďalej slúžia ako kryštalizačné zárodky a po dosiahnutí kritických rozmerov ďalej rastú. Výsledkom môže byť monokryštalická, prípadne polykryštalická súvislá vrstva [1].

Veľkou prednosťou PLD v porovnaní s príbuznými metódami, ktoré môžu byť používané na prípravu tenkých vrstiev je relatívne

jednoduchý princíp a vysoká univerzálnosť vzhľadom na experimentálne použiteľné materiály. Metóda nie je obmedzená elektrickými, optickými a termofyzikálnymi vlastnosťami materiálov a je vhodná tak pre elektricky vodivé aj dielektrické látky, rovnako ako materiály s nízkymi, či vysokými teplotami tavenia. V prípade kovov sa teploty ich tavenia, prípadne vyparovania pohybujú na úrovni tisícov °C a ani takéto vysoké teploty nie sú obmedzujúcim faktorom pre ich účinnú abláciu intenzívnym laserovým zväzkom [2].

Experimentálne boli pripravené vrstvy rôznych kovov (Pt, Au, Ag, Ir, Pd). V ich prípade ide o vzácne kovy so špecifickými katalytickými vlastnosťami a pri príprave tenkých vrstiev pomocou PLD je možné pripraviť ich v hrúbkach od jednotiek nm až po mikrometre. Vlastnosti vrstiev boli následne analyzované pomocou SIMS (Secondary Ion Mass Spectroscopy).

[1] D. B. Chrisey, G. K. Hubler, Pulsed laser deposition of thin films, Wiley, New York, 1994..

[2] P.R. Willmot, J.R. Huber, Rev. Mod. Phys. 72 (2000) 315-328.

AUTORSKÝ INDEX

A

Abdel-Mohsen A. M. 100
Adam M. 116, 118
Aguedo J. 128
Almáši M. 83, 150, 151, 164
Androvič L. 97
Andrys R. 83, 155, 156, 158
Arenillas A. 140
Ashcheulov P. 61
Aulichová V. 153

B

Bacova J. 116
Badač A. 83, 150
Bago-Pilátová M. 154, 160
Bajcura M. 130, 168
Balasubramanian P. 135
Baláž M. 134
Baliak P. 66
Baluchová S. 61, 63, 111
Barek J. 64, 71
Baroch M. 117
Bartáček J. 99
Barták P. 70
Bartoň J. 172
Bártová I. 94
Bártová M. 65
Bednář P. 70
Bedrnová E. 135
Benediková M. 139
Beneš L. 148
Benická B. 121
Benköová M. 105, 106
Berkeš D. 84, 85, 152
Bernauer M. 165, 166
Bertók T. 111, 128
Bertóková A. 111
Bianco A. 91
Bičák V. 74
Bielková Z. 115
Bieńko A. 109
Bílek M. 163
Bláhová E. 63, 112
Blaise N. 90
Blaško J. 109
Blaškovičová J. 72
Boča M. 80, 132
Boča R. 109, 115
Bortňák D. 88, 157
Bouzek K. 101, 102, 103, 104, 175
Bovoloni M. 91
Brázdová A. 153
Bruncko J. 176
Bučinský L. 76
Budzák Š. 90, 91
Bulgakova N. 61
Bulko F. 87
Burčák M. 164
Burdová H. 73, 165
Buriánek J. D. 104
Buršíková V. 173
Buziková M. 79
Bužková A. 145, 146
Bystron T. 104

C

Čacho F. 117, 123
Caletková O. 84, 85
Čambal P. 111
Capek J. 116
Capek P. 161
Cavallini M. 77
Čech J. 173
Cehlár O. 131
Čekan P. 86
Čermáková L. 128
Černošková E. 81
Červenková A. 104
Chavhan M. 83
Chomča I. 164
Chýlková J. 124
Cibulková Z. 130, 133
Čičvák T. 151
Cifraničová K. 110, 167
Cigáň M. 90, 91
Cígler P. 131, 135, 142, 143, 153, 157, 172
Cincula T. 127
Císařová I. 152
Compeľová K. 137
Copak J. 131, 153
Cordeiro M. N. D. S. 76
Culková E. 62

Cvečko M. ... 84

D

Daňhel A. ... 114, 118, 126
Danielik V. ... 104
Danielovič I. ... 164
Dejmková H. ... 61, 117
Denk K. ... 102
Detková K. R. ... 152
Dinajová J. ... 164
Dixon D. J. ... 87
Dobiáš V. ... 97
Dobrovodský D. ... 68, 114
Doháňošová J. ... 152
Doležal R. ... 163
Doušová B. ... 135, 143
Drahoš B. ... 78, 145, 150
Drašar Č. ... 148
Dubaj T. ... 130, 133
Duhačková Ľ. ... 109
Dušek L. ... 72, 98, 167
Dvořáková H. ... 173

E

Eisner A. ... 116, 118
Elbl J. ... 173
Elečko J. ... 154
Etrych T. ... 171

F

Fábian M. ... 160
Fajstavr D. ... 147
Feriancová L. ... 152
Ferko B. ... 87, 152
Fialova E. ... 131, 153
Fíla V. ... 165, 166
Filipi D. ... 97
Filo J. ... 90, 91
Fischer J. ... 61, 113, 125
Fleming S. ... 132
Fojta M. ... 61, 68, 69, 114
Formánek B. ... 153
Franc A. ... 172
Fraňová P. ... 89
Fričová O. ... 136
Frýdlová B. ... 147
Fuchsova A. ... 155
Fulín M. ... 109

G

Galamboš M. ... 127
Galiová M. V. ... 122
Galusek D. ... 60
Ganajová M. ... 164
Garberová M. ... 154
Gatalo M. ... 104
Gemeiner P. ... 62, 71
Gentili D. ... 77
Gobec S. ... 158
Goněc T. ... 154
Gonzalez R. B. ... 131
Górová R. ... 127
Grabarz A. M. ... 90
Grambličková L. ... 162
Grantz Šašková K. ... 153, 157
Greifová M. ... 95, 96
Grossberger D. ... 146
Gruchaľák R. ... 109
Grycová B. ... 165
Gulka M. ... 131, 135
Gyepes R. ... 84

H

Haas M. ... 74
Hajdúchová Z. ... 136, 137
Hájek M. ... 96
Hájková V. ... 73
Hala M. ... 175
Halaš P. ... 150
Haluz P. ... 84
Hamala V. ... 118
Hamuľaková S. ... 164
Hanusek J. ... 86
Harmošová M. ... 138
Haško D. ... 119
Haššo M. ... 65
Hatala M. ... 62, 71
Havlíček J. ... 163
Havran L. ... 68, 69
Hegedüsová L. ... 90
Held Ľ. ... 94
Herchel R. ... 77, 78, 150
Hermanová M. ... 68, 69
Hesko O. ... 69
Híveš J. ... 105, 106, 176
Hnát J. ... 101, 102, 103
Hochvaldová L. ... 113, 138, 144
Hodnik N. ... 104
Hojová L. ... 72
Honzíček J. ... 96, 99

Hrabovský J. 61, 113
Hradečná K. 101
Hrdá E. 97
Hrdlička V. 70
Hricovíni Michal 131
Hricovíni Miloš 131
Hricovíniová J. 155
Hricovíniová Z. 155
Hroboňová K. 67
Hrončeková Š. 128
Hronová D. 103
Hrušková M. 69
Humajová P. 66

I

Iablochkin K. 165, 166
Ingr T. 148

J

Jablonský M. 166
Jakubec P. 85, 88, 152
Jampílek J. 154
Jamrichová J. 154
Jančálek J. 82
Jančíková V. 166
Jančiová E. 84
Janďourek O. 156
Jáné E. 120
Janek M. 136
Janíková L. 124
Jebavá A. 66
Jedináková M. 95
Jelezko F. 131, 135
Jelšíková K. 112
Jemelka J. 82
Jerga R. 70
Jerigová M. 132, 134, 162, 176
Jewula P. 92
Juráková J. 77
Jurašková S. 136
Jurdáková H. 127
Jurmanová J. 173

K

Kadlecová V. 154
Kamínková S. 140
Kantserova M. 165
Karban J. 118
Karnišová Potocká E. 84
Kasák P. 128
Katrlík J. 120
Kekeľáková A. 65
Kelíšková P. 124
Kello M. 138
Kelnar I. 100
Kelnarová A. 119
Kemény M. 133
Kepeňová M. 139
Kerekeš K. 176
Kešeľáková A. 154
Khun J. 135
Kianičková K. 120
Kinnertová E. 119, 139
Kirakci K. 171
Kis P. 84
Klemencová K. 165
Klement R. 81
Klempová S. 98
Knittelová K. 83, 155, 158
Knotek P. 81
Kocúrik M. 99
Kodým R. 102, 103, 175
Kohoutová Z. 83, 156, 158
Kolář K. 163
Kolář M. 96, 138
Kolaříková M. 113
Kolářová H. 113
Kolarovič A. 84
Koloušek D. 135
Kolská Z. 140, 149, 170
Komersová A. 168, 170
Konečná K. 156
Kopčan P. 119
Koperová D. 94
Kořená L. 139, 140
Korenko M. 141, 144
Kos J. 154
Košťúr R. 105
Kotásková L. 92
Kotek J. 79
Kotora M. 152
Koťuhová K. 132, 176
Kotuľáková K. 94
Koudelíková R. 163
Kováčiková G. 65
Kovarik Z. 83
Kovářová Z. 108
Kowalczyk S. 141
Kozlík P. 68
Kozmon S. 134
Královič D. P. 110, 167
Krátký M. 156

Krejčí P. 70
Krejčová A. 169
Kreps F. 95, 96
Krepsová Z. 95, 96
Krishnan D. 141
Kříženecká S. 73
Krtková K. 120
Krupková O. 167
Krůšek J. 63
Kubešová J. 112
Kubíčková A. 125
Kubíková B. 80, 132, 141
Kubincová J. 109
Kuchár J. 149
Kuchárová V. 149
Kuchtová G. 72, 167
Kudličková Z. 154
Kukura P. 58
Kundalia P. H. 120
Kunštek M. 109
Kupcová E. 121
Kuráň P. 165
Kurjan J. 142
Kurka M. 82
Kutálek P. 81
Kuzielová E. 136, 137
Kvaková K. 142
Kvítek L. 108, 138, 145
Kwoczynski Z. 165

L

Labuda J. 71, 122
Laga R. 97
Laluhová T. 115
Lang K. 171
Laštovičková L. 128
Lavičková J. 154
Lepleux S. 131
Leštinský P. 165
Lhotka M. 135, 143, 175
Li X. 70
Liébanas F. J. A. 108
Liška A. 74
Litecká M. 138, 139, 142
Lobato A. C. B. 69
Lodňánek P. 175
Lopatková L. 98
López S. L. F. 140
Lorenc D. 132, 134
Lorencová L. 120, 128
Loukotová L. 143, 153
Lubal P. 66
Ludvík J. 74
Lukáč M. 130, 168
Lukavský J. 161
Lyčka A. 89
Lytvynenko A. 63
Lytvynenko O. 143, 157
Lyutakov O. 149

M

Macak J. M. 116
Macháčková J. 168, 170
Machalová M. 122
Machková V. 94
Machotová J. 96, 100
Magdolen P. 91
Májek M. 90
Malatinský T. 85
Malček M. 76, 133
Malečková S. 98
Malina M. 115
Maliňák D. 83, 155, 156, 158
Mališová E. 105
Manová A. 121
Marčeková M. 152
Marchalín Š. 89
Marcinov P. 164
Marek L. 86
Markvartová A. 123
Maroszová J. 106
Martinková M. 160
Marton M. 72
Masác J. 117, 123
Másilko J. 136
Mastihuba V. 84
Mastihubová M. 60, 84
Mastný L. 175
Matselko O. 80
Matulová M. 161
Matušková E. 99
Matvieiev O. 124
Matyašovský J. 86
Matzick K. 168
Mečiarová M. 159
Medveď M. 90
Michalka M. 176
Mičová R. 109
Mičušík M. 80
Mikysek T. 65
Milata V. 88, 92, 106, 157
Mišíková F. 169
Mistrik M. 144
Mlynáriková J. 132

Molnárová K. 68
Moncoľ J. 81
Morávková Z. 163
Moussa W. 169
Mravec B. 90
Mucha M. 93, 120
Müllerová S. 76
Musílek K. 83, 155, 156, 158

N

Navrátil J. 148
Navrátil T. 70
Nebeská D. 165
Neburková J. 172
Nemec I. 77, 92
Němeček M. 103
Netriová Z. 80, 144
Neubertová V. 170
Neugebauer P. 92
Neugebauerova M. 156
Nevyhoštěná M. 168, 170
Noskovičová E. 132
Nováková J. 132, 134
Novotná E. 128

O

Oriňaková R. 164
Orvoš J. 77
Ostatná V. 118, 126

P

Paidar M. 102, 175
Pálka K. 82
Panáček A. 113, 138, 144, 145
Parchaňská A. 171
Pařízek O. 124
Pašteka L. F. 90
Patočka J. 169
Pavelka O. 142
Pavílek B. 88, 157
Pavko L. 104
Pavlík V. 137
Pavloková S. 172
Pažitná L. 120
Pecha K. 173
Pechar M. 171
Pejchal V. 170
Petrezselyová S. 153
Pichon C. 150
Pilař L. 135
Pilátová H. 119
Pilnaj D. 165
Pinčeková L. 84
Pindjaková D. 154
Pinkeová A. 111
Pinková Gajdošová V. 128
Pisárčik M. 130, 168
Pivoňková H. 68
Plecháček T. 148
Plevová M. 101
Pochobradský J. 99
Pocklanová R. 145
Podzimek Š. 96
Pola R. 171
Poláková J. 111
Potočňák I. 138, 139, 142, 154
Poupon M. 80
Pramanik G. 142
Pražáková L. 125
Pražáková M. 78, 145
Přibyl T. 171
Priss A. 153, 157
Procházková E. 91
Prokeš L. 173
Prokop M. 104, 175
Prucek R. 145, 146, 148
Pryjmaková J. 146, 147
Psotka M. 156, 158
Puchart V. 169
Purdeková M. 62
Putala M. 87, 151, 159

R

Ráheľ J. 173
Rajnák C. 109, 115
Rakhmatullin A. 144
Rapta P. 75
Raptová R. 133
Reháková M. 58
Renčiuk D. 114
Rendošová M. 164
Renz F. 115
Řezáčová L. 66
Rievaj M. 62
Rousar T. 116
Rubeš D. 99
Ruml T. 171
Rusek M. 94
Rusko M. 121

S

Šácha M. 75
Sádecká J. 67
Šafář P. 89
Šagátová A. 77
Sajjadi M. S. 81
Šalitroš I. 77
Samoľová E. 80, 109, 115, 138
Samsonova E. 81
Šandrejová J. 164
Santana V. 92
Sarakhman O. 62, 71
Šauša O. 110, 167
Schimer J. 143, 153
Schlesingerová E. 119
Schmidt M. 83
Schniererová K. 159
Scholtz V. 135
Schubertová S. 96
Schwarz J. 81
Schwarzová-Pecková K. 61, 63, 111, 112, 113
Šebest P. 126
Šebesta R. 159
Šebová D. 138
Sedláčková L. 172
Sedlák F. 153
Sedlák M. 99
Sedlářová I. 175
Šelešovská R. 124
Serbanová L. 63
Shagieva E. 135
Siegel J. 146, 147
Sigmundová I. 91
Šikorová E. 156
Šimko F. 141, 144
Šimková A. 156
Šimon P. 100, 130, 133
Šimonová Z. F. 100
Šimunková M. 133
Sirotek V. 94
Skarka A. 83
Skopalová J. 70, 112
Skopalová V. 70
Škrabana R. 131
Škrha J. sr. 123
Skrott Z. 144
Šlang S. 82
Slaný M. 137
Slavov Ch. 90
Slepička P. 147
Slepičková Kasálková N. 147
Slovák V. 139, 140, 141
Šmejkal P. 94
Smejkalová E. 159
Šnita D. 103
Sofer Z. 166
Sojka A. 148
Soldánová M. 151
Sopha H. 116
Souki K. S. A. 165
Sow M. 131
Špačková A. 67
Špaková Raschmanová J. 160
Španielová H. 172
Sťahel P. 173
Stankovianska K. 159
Stankovičová H. 159
Štarha P. 163
Štefková B. 148
Stehlík J. 145
Stehlik S. 135
Štekláč M. 133
Štěpánková Š. 156, 170
Ševuľová R. 176
Štibrányi L. 106
Stračina T. 122
Stratilová B. 134
Strhársky T. 154
Štrofová J. 94
Stupavská M. 173
Sudzina A. 160
Sutter J-P. 150
Švábková N. 159
Švajdlenková H. 110, 167
Švancarová Laštincová J. 66
Švec P. 153
Svitková V. 122
Svoboda J. 86, 99
Svobodová M. 159
Švorc Ľ. 62, 65, 71
Švorčík V. 140, 149, 170
Szarka A. 108
Szöcs V. 134
Szöcs V. 132

T

Tavares M. R. 171
Taylor A. 61, 111, 113
Tichý D. 103
Tiňo R. 98
Titiš J. 109, 115
Tkáč J. 111, 128
Tomčík P. 62
Tomíková A. 111

Tommasini M. ... 91
Tóthová D. ... 127
Tran K. ... 115
Trnková E. ... 116
Trnková L. ... 70
Trögl J. ... 165
Trtúšek M. ... 90
Tuniz A. ... 132
Turjan J. ... 161
Tvrdoňová M. ... 154, 161

U

Uher M. ... 92
Uhliariková I. ... 161

V

Vadkertiová R. ... 155
Valachová D. ... 85
Valenta J. ... 142
Valentine M. ... 90
Valko M. ... 133
Válková L. ... 113
Váňa J. ... 86
Vaněk V. ... 153, 157
Vaneková L. ... 153
Várfalvyová A. ... 121
Vargová Z. ... 59, 164
Vaskova Z. ... 80
Večeřová R. ... 138
Végh D. ... 88, 157
Velič D. ... 132
Veselá M. ... 97
Veselý M. ... 97, 173
Vídenský J. ... 175
Víglaský V. ... 164
Viktoryová N. ... 108
Vilková M. ... 138, 142, 154
Vinklárek J. ... 99
Vinšová J. ... 156
Vitushkina S. ... 149
Vizárová K. ... 98
Vlček M. ... 82
Vodičková K. ... 121
Vojs M. ... 72, 124
Vojs Staňová A. ... 72
Vrablík M. ... 123
Vráblová L. ... 127
Vyhlídalová J. ... 150
Vyskočil V. ... 71

W

Wachtveitl J. ... 90
Widimský J. jr. ... 123
Williams O. A. ... 61
Wsól V. ... 128

Y

Youmbissi I. L. Y. ... 66

Z

Zabelin D. ... 149
Zabelina A. ... 149
Záchenská J. ... 102
Zahradníková E. ... 150
Zalibera M. ... 109
Žaloudková L. ... 118
Záruba D. ... 173
Zelenka J. ... 100, 171
Zelenka T. ... 83, 139, 150, 151
Zelenková G. ... 139, 151
Zelenský M. ... 113
Zelinka M. ... 126
Zelinka T. ... 123
Zemanová M. ... 102, 105
Žemlička M. ... 136
Zich J. ... 148
Žitka J. ... 101
Žitňan M. ... 76
Zlámal M. ... 165, 173, 175
Zorbaz T. ... 83
Zrníková K. ... 146
Zuzak Y. ... 161
Zwaan Z. ... 173

PROGRAM PREDNÁŠOK

SEKCIA 1 ANALYTICKÁ CHÉMIA

(hod:min)	(hod:min)	(hod:min)		**Utorok, 5. septembra 2023**
Začiatok	**Koniec**	**Trvanie**	**Popis**	**Prezentujúci autor, názov prednášky**
09:00	09:30	00:30		Otvorenie zjazdu, kongresová sála Grand Hotel Bellevue
09:30	10:00	00:30		Príhovory hostí zjazdu
10:00	11:00	01:00	**Plenárna prednáška**	**Philipp Kukura** **Mass photometry: weighing molecules with light**
11:00	12:00	01:00		Ocenenia SChemS
12:00	14:00	02:00	Obed	Obed, Grand Hotel Bellevue
14:00	**14:50**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Milena Reháková** **Úloha chémie a materiálových analýz v procesoch ochrany kultúrneho dedičstva** miestnosť: Bellevue I
14:50	15:00	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivé sekcie
15:00	15:10	00:10	Úvod	Otvorenie odborných sekcií - úvodné slová garantov
Sekcia 1 Analytická chémia				**Predsedajúci sekcie: Ľubomír Švorc** miestnosť: Bellevue I
15:10	15:30	00:20	Prednáška	**Ľubomír Švorc** Biochar ako perspektívny a zelený elektródový materiál pre elektrochemické senzory
15:30	15:50	00:20	Komerčná prednáška	**Peter Barath (Metrohm, ČR)** Seznamte se, Metrohm
15:50	16:10	00:20	Komerčná prednáška	**Piotr Golkiewicz (Elsevier Life Science Solutions)** Reaxys Academic Edition – how to utilise full power of Reaxys to support academic chemistry research and education
16:10	16:40	00:30	Prestávka	Občerstvenie
16:40	17:00	00:20	Prednáška	**Eva Culková** Voltampérometrická metóda pre detekciu oxidu siričitého vo víne založená na elektróde z diamantu dopovaného bórom a reakčnej elektrochémii bez interferencií

17:00	17:20	00:20	Prednáška	**Eva Bláhová** Studium voltametrického chování 7β-hydroxycholesterolu na elektrodě z borem dopovaného diamantu
17:20	17:40	00:20	Prednáška	**Anton Lytvynenko** Performance of different boron-doped diamond surface states in electrochemical detection of neurotransmitters in neuron cultivation medium
18:00	20:00	02:00	Večera	Večera, Grand Hotel Bellevue
20:00	23:00	03:00	Postery	Posterové prezentácie a vínny večer

(hod:min)	(hod:min)	(hod:min)		**Streda, 6. september 2023**
Začiatok	**Koniec**	**Trvanie**	**Popis**	**Prezentujúci autor, názov prednášky**
8:30	**9:20**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Zuzana Vargová** **Biologický potenciál koordinačných zlúčenín zinku a striebra** miestnosť: Bellevue I
9:20	9:30	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivé sekcie
Sekcia 1 Analytická chémia				**Predsedajúca sekcie: Katarína Hroboňová** miestnosť: Bellevue II
9:40	10:00	00:20	Prednáška	**Petr Solich** Flow techniques for sample pretreatment
10:00	10:20	00:20	Prednáška	**Jiří Barek** Vsádová injekční analýza
10:20	10:40	00:20	Prednáška	**Marek Haššo** Vsádzková injekčná analýza ako účinný analytický prostriedok vo farmaceutickej praxi
10:40	11:00	00:20	Prestávka	Občerstvenie
Sekcia 1 Analytická chémia				**Predsedajúca sekcie: Jana Blaškovičová** miestnosť: Bellevue II
11:00	11:20	00:20	Prednáška	**Michaela Bártová** Katecholázová aktivita komplexů mědi: v roztoku vs. na povrchu částic
11:20	11:40	00:20	Prednáška	**Jarmila Švancarová Laštincová** Methods of rapid heavy metals determination in wine samples
11:40	12:00	00:20	Prednáška	**Ivan Landry Yumdjo Youmbissi** Synthesis and analytical applications of CdTe-QD's nanoparticles
12:00	14:00	02:00	Obed	Obed

14:00	**14:50**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Dušan Galusek** **Môže nám sklo pomôcť v boji proti baktériám rezistentným na antibiotiká?** miestnosť: Bellevue I
14:50	15:00	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivých sekcie
Sekcia 1 Analytická chémia				**Predsedajúci sekcie: Ján Labuda** miestnosť: Bellevue II
15:00	15:20	00:20	Prednáška	**Katarína Hroboňová** Advanced selective materials as adsorbents for sample preparation extraction techniques and HPLC analysis of bioactive compounds
15:20	15:40	00:20	Prednáška	**Andrea Špačková** Development of molecularly imprinted polymer and its magnetic version for the extraction of panthenol from personal care products
15:40	16:00	00:20	Prednáška	**Katarína Molnárová** Glycopeptide enrichment on polar stationary phases in hydrophilic interaction liquid chromatography mode
16:00	16:20	00:20	Prestávka	Občerstvenie
16:20	16:40	00:20	Prednáška	**Tomáš Pluháček** Chemický otisk jako nástroj pro určení provenience radiolaritových artefaktů
16:40	17:00	00:20	Prednáška	**Lucia Hojová** Elektrochemická oxidácia vybraných perzistentných zlúčenín a identifikácia ich degradačných a transformačných produktov
17:00	17:20	00:20	Prednáška	**Jana Blaškovičová** Vplyv triklosanu a strieborných nanočastíc na DNA/GCE biosenzor
17:20	17:40	00:20	Prednáška	**Sylvie Kříženecká** Validace metody pro stanovení aminokyselin v půdách
18:00	20:00	02:00	Večera	Večera
20:00	21:00	01:00	Diskusia	Diskusia členov SChemS a ČSCH o vzájomnej spolupráci, Salónik KRISTAL
20:00	23:00	03:00	Postery	Posterové prezentácie a pivný večer

(hod:min)	(hod:min)	(hod:min)		**Štvrtok, 7. september 2023**
Začiatok	**Koniec**	**Trvanie**	**Popis**	**Prezentujúci autor, názov prednášky**

8:30	**9:20**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Mária Mastihubová** **Prínos enzymatickej acylácie ku syntéze prírodných glykofenolík** miestnosť: Bellevue I
9:20	9:30	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivé sekcie
Sekcia 1 Analytická chémia				**Predsedajúci sekcie: Jiří Barek** miestnosť: Bellevue I
9:30	9:50	00:20	Prednáška	**Tomáš Navrátil** SWOT analýza eliminační voltametrie s lineárním scanem
9:50	10:10	00:20	Prednáška	**Jana Skopalová** Netradiční spojení elektrochemie s hmotnostní spektrometrií: analýza elektrolytických produktů adsorbovaných na elektrodě
10:10	10:30	00:20	Prednáška	**Olha Sarakhman** Is biochar a reliable substitute for carbon black in electrochemical sensing?
10:30	10:50	00:20	Prestávka	Občerstvenie
10:50	11:10	00:20	Prednáška	**Miroslav Fojta** Struktura DNA na elektrodách: možná úskalí a cesty k jejich překonání
11:10	11:30	00:20	Prednáška	**Monika Hermanová** Komplexy DNA oligonukleotidů a složek DNA s ionty rtuti
11:30	11:50	00:20	Prednáška	**Ondrej Hesko** Vývoj citlivého a selektívneho elektrochemického biosenzora pre detekciu viroidov (CBCVD)
12:00	14:00	02:00	Obed	Obed
14:00	18:00	04:00		Voľné poobedie
18:00	20:00	02:00	Večera	Večera
20:00	24:00	04:00		Slávnostný večierok, odovzdávanie ocenení, vyhodnotenie posterovej súťaže (Sála Grand Bellevue)

(hod:min)	(hod:min)	(hod:min)		**Piatok, 8. september 2023**
Začiatok	**Koniec**	**Trvanie**	**Popis**	

9:00	**9:50**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Karolina Schwarzová** **Borem dopovaný diamant: Perspektivy "netradičního" elektrodového materiálu po třiceti letech výzkumu** miestnosť: Bellevue I
9:50	10:00	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivé sekcie
10:00	12:00	02:00	Prednášky	Prednášky v sekciách 4, 5 a 6
12:00	14:00	02:00	Obed	Obed

SEKCIA 2 FYZIKÁLNA CHÉMIA

(hod:min)	(hod:min)	(hod:min)		**Utorok, 5. septembra 2023**
Začiatok	**Koniec**	**Trvanie**	**Popis**	**Prezentujúci autor, názov prednášky**
09:00	09:30	00:30		Otvorenie zjazdu, kongresová sála Grand Hotel Bellevue
09:30	10:00	00:30		Príhovory hostí zjazdu
10:00	11:00	01:00	**Plenárna prednáška**	**Philipp Kukura** **Mass photometry: weighing molecules with light**
11:00	12:00	01:00		Ocenenia SChemS
12:00	14:00	02:00	Obed	Obed, Grand Hotel Bellevue
14:00	**14:50**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Milena Reháková** **Úloha chémie a materiálových analýz v procesoch ochrany kultúrneho dedičstva** miestnosť: Bellevue I
14:50	15:00	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivé sekcie
15:00	18:00	03:00	Prednášky	Prednášky v sekciách 1, 6 a 7
18:00	20:00	02:00	Večera	Večera, Grand Hotel Bellevue
20:00	23:00	03:00	Postery	Posterové prezentácie a vínny večer

(hod:min)	(hod:min)	(hod:min)		**Streda, 6. september 2023**
Začiatok	**Koniec**	**Trvanie**	**Popis**	**Prezentujúci autor, názov prednášky**
8:30	**9:20**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Zuzana Vargová** **Biologický potenciál koordinačných zlúčenín zinku a striebra** miestnosť: Bellevue I

9:20	9:30	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivé sekcie
9:30	12:00	02:30	Prednášky	Prednášky v sekciách 1, 3 a 4
12:00	14:00	02:00	Obed	Obed
14:00	**14:50**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Dušan Galusek** **Môže nám sklo pomôcť v boji proti baktériám rezistentným na antibiotiká?** miestnosť: Bellevue I
14:50	15:00	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivých sekcie
Sekcia 2 Fyzikálna chémia				**Predsedajúci sekcie: Peter Šimon** miestnosť: Salónik KRISTAL
15:00	15:20	00:20	Prednáška	**Vojtěch Bičák** Elektrochemická studie vybraných acylgermanů
15:20	15:40	00:20	Prednáška	**Alan Liška** Metoda skupinových příspěvků pro kvalifikované odhady prvních redoxních potenciálů
15:40	16:00	00:20	Prednáška	**Peter Rapta** EPR and UV–VIS–NIR spectroelectrochemistry of biologically active copper complexes
16:00	16:20	00:20	Prestávka	Občerstvenie
16:20	16:40	00:20	Prednáška	**Martin Šácha** Usage of dopped sapphires as multimodal markers for in-vivo imaging
16:40	17:00	00:20	Prednáška	**Michal Žitňan** Relationship between photocatalytic degradation of organic dyes and photocatalytic water splitting in oxide and sulfide semiconductors
17:00	17:30	00:30	Pozvaná prednáška v sekcii	**Michal Malček** Computational study of modified graphene-based nanomaterials
18:00	20:00	02:00	Večera	Večera
20:00	21:00	01:00	Diskusia	Diskusia členov SChemS a ČSCH o vzájomnej spolupráci, Salónik KRISTAL
20:00	23:00	03:00	Postery	Posterové prezentácie a pivný večer

(hod:min)	(hod:min)	(hod:min)		**Štvrtok, 7. september 2023**
Začiatok	**Koniec**	**Trvanie**	**Popis**	**Prezentujúci autor, názov prednášky**

8:30	**9:20**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Mária Mastihubová** **Prínos enzymatickej acylácie ku syntéze prírodných glykofenolík** miestnosť: Bellevue I
9:20	9:30	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivé sekcie
9:30	12:00	02:30	Prednášky	Prednášky v sekciách 1, 3 a 4
12:00	14:00	02:00	Obed	Obed
14:00	18:00	04:00		Voľné poobedie
18:00	20:00	02:00	Večera	Večera
20:00	24:00	04:00		Slávnostný večierok, odovzdávanie ocenení, vyhodnotenie posterovej súťaže (Sála Grand Bellevue)

(hod:min)	(hod:min)	(hod:min)		**Piatok, 8. september 2023**
Začiatok	**Koniec**	**Trvanie**	**Popis**	
9:00	**9:50**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Karolina Schwarzová** **Borem dopovaný diamant: Perspektivy "netradičního" elektrodového materiálu po třiceti letech výzkumu** miestnosť: Bellevue I
9:50	10:00	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivé sekcie
10:00	12:00	02:00	Prednášky	Prednášky v sekciách 4, 5 a 6
12:00	14:00	02:00	Obed	Obed

SEKCIA 3 ANORGANICKÁ A MATERIÁLOVÁ CHÉMIA

(hod:min)	(hod:min)	(hod:min)		**Utorok, 5. septembra 2023**
Začiatok	**Koniec**	**Trvanie**	**Popis**	**Prezentujúci autor, názov prednášky**
09:00	09:30	00:30		Otvorenie zjazdu, kongresová sála Grand Hotel Bellevue
09:30	10:00	00:30		Príhovory hostí zjazdu
10:00	11:00	01:00	**Plenárna prednáška**	**Philipp Kukura** **Mass photometry: weighing molecules with light**
11:00	12:00	01:00		Ocenenia SChemS

12:00	14:00	02:00	Obed	Obed, Grand Hotel Bellevue
14:00	**14:50**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Milena Reháková** **Úloha chémie a materiálových analýz v procesoch ochrany kultúrneho dedičstva** miestnosť: Bellevue I
14:50	15:00	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivé sekcie
15:00	18:00	03:00	Prednášky	Prednášky v sekciách 1, 6 a 7
18:00	20:00	02:00	Večera	Večera, Grand Hotel Bellevue
20:00	23:00	03:00	Postery	Posterové prezentácie a vínny večer

(hod:min)	(hod:min)	(hod:min)		**Streda, 6. september 2023**
Začiatok	**Koniec**	**Trvanie**	**Popis**	**Prezentujúci autor, názov prednášky**
8:30	**9:20**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Zuzana Vargová** **Biologický potenciál koordinačných zlúčenín zinku a striebra** miestnosť: Bellevue I
9:20	9:30	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivé sekcie
Sekcia 3 Anorganická a materiálová chémia				**Predsedajúci sekcie: Ivan Šalitroš** miestnosť: Salónik SILVER
9:40	10:00	00:20	Prednáška	**Jana Juráková** Neutral cobalt(II)-bis(benzimidazole)pyridine field-induced single-ion magnets
10:00	10:20	00:20	Prednáška	**Alexandra Šagátová** Light-induced isomerization of azophenyl moiety in SCO active Fe(II) complexes
10:20	10:40	00:20	Prednáška	**Radovan Herchel** Manganaté koordinační sloučeniny s makrocyklyckými ligandy pohledem kvantové chemie
10:40	11:00	00:20	Prestávka	Občerstvenie
Sekcia 3 Anorganická a materiálová chémia				**Predsedajúci sekcie: Radovan Herchel** miestnosť: Salónik SILVER
11:00	11:20	00:20	Prednáška	**Ivan Šalitroš** Cobalt(II) complexes with bis(pyrazolyl)pyridine ligands acting as field-induced single-ion magnets
11:20	11:40	00:20	Prednáška	**Michaela Buziková** Nukleázová aktivita koordinačných zlúčenín založených na derivátoch triazacyklononánu

11:40	12:00	00:20	Komerčná prednáška	**Ivo Novotný (LabRulez, ČR)** Portály LabRulez: Jak se stát jejich součástí a vyhledávat informace
12:00	14:00	02:00	Obed	Obed
14:00	**14:50**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Dušan Galusek** **Môže nám sklo pomôcť v boji proti baktériám rezistentným na antibiotiká?** miestnosť: Bellevue I
14:50	15:00	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivých sekcie
15:00	17:30	02:30	Prednášky	Prednášky v sekciách 1, 2 a 7
18:00	20:00	02:00	Večera	Večera
20:00	21:00	01:00	Diskusia	Diskusia členov SChemS a ČSCH o vzájomnej spolupráci, Salónik KRISTAL
20:00	23:00	03:00	Postery	Posterové prezentácie a pivný večer

(hod:min)	(hod:min)	(hod:min)		**Štvrtok, 7. september 2023**
Začiatok	**Koniec**	**Trvanie**	**Popis**	**Prezentujúci autor, názov prednášky**
8:30	**9:20**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Mária Mastihubová** **Prínos enzymatickej acylácie ku syntéze prírodných glykofenolík** miestnosť: Bellevue I
9:20	9:30	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivé sekcie
Sekcia 3 Anorganická a materiálová chémia				**Predsedajúci sekcie: Ivan Šalitroš** miestnosť: Bellevue II
9:30	9:50	00:20	Prednáška	**Oksana Matselko** New mixed cation heptafluorozirconates/hafnates
9:50	10:10	00:20	Prednáška	**Ján Moncoľ** Geometrický index pre hexakoordinované zlúčeniny
10:10	10:30	00:20	Prednáška	**Mir Saeed Sajjadi** $In_2S_3/Bi_2WO_6/Fe_3O_4$ magnetic core-shell stucture as an efficient catalyst for sono-photo hybrid catalytic degradation of tetracycline
10:30	10:50	00:20	Prestávka	Občerstvenie
Sekcia 3 Anorganická a materiálová chémia				**Predsedajúci sekcie: Ján Moncoľ** miestnosť: Bellevue II
10:50	11:10	00:20	Prednáška	**Ekaterina Samsonova** Photoinduced modification of the Ge-As-S glass surface

11:10	11:30	00:20	Prednáška	**Jiří Jemelka** Příprava a charakterizace tenkých vrstev chalkogenidových skel systémů As-Se a As-S-Se z modifikovaného roztoku skla $As_{50}Se_{50}$
11:30	11:50	00:20	Prednáška	**Tomáš Zelenka** MOF-uhlíkaté kompozity pro sorpci oxidu uhličitého
12:00	14:00	02:00	Obed	Obed
14:00	18:00	04:00		Voľné poobedie
18:00	20:00	02:00	Večera	Večera
20:00	24:00	04:00		Slávnostný večierok, odovzdávanie ocenení, vyhodnotenie posterovej súťaže (Sála Grand Bellevue)

(hod:min)	(hod:min)	(hod:min)		**Piatok, 8. september 2023**
Začiatok	**Koniec**	**Trvanie**	**Popis**	
9:00	**9:50**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Karolina Schwarzová** **Borem dopovaný diamant: Perspektivy "netradičního" elektrodového materiálu po třiceti letech výzkumu** miestnosť: Bellevue I
9:50	10:00	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivé sekcie
10:00	12:00	02:00	Prednášky	Prednášky v sekciách 4, 5 a 6
12:00	14:00	02:00	Obed	Obed

SEKCIA 4 ORGANICKÁ CHÉMIA

(hod:min)	(hod:min)	(hod:min)		**Utorok, 5. septembra 2023**
Začiatok	**Koniec**	**Trvanie**	**Popis**	**Prezentujúci autor, názov prednášky**
09:00	09:30	00:30		Otvorenie zjazdu, kongresová sála Grand Hotel Bellevue
09:30	10:00	00:30		Príhovory hostí zjazdu
10:00	11:00	01:00	**Plenárna prednáška**	**Philipp Kukura** **Mass photometry: weighing molecules with light**
11:00	12:00	01:00		Ocenenia SChemS
12:00	14:00	02:00	Obed	Obed, Grand Hotel Bellevue

14:00	**14:50**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Milena Reháková** **Úloha chémie a materiálových analýz v procesoch ochrany kultúrneho dedičstva** miestnosť: Bellevue I
14:50	15:00	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivé sekcie
15:00	18:00	03:00	Prednášky	Prednášky v sekciách 1, 6 a 7
18:00	20:00	02:00	Večera	Večera, Grand Hotel Bellevue
20:00	23:00	03:00	Postery	Posterové prezentácie a vínny večer

(hod:min)	(hod:min)	(hod:min)		**Streda, 6. september 2023**
Začiatok	**Koniec**	**Trvanie**	**Popis**	**Prezentujúci autor, názov prednášky**
8:30	**9:20**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Zuzana Vargová** **Biologický potenciál koordinačných zlúčenín zinku a striebra** miestnosť: Bellevue I
9:20	9:30	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivé sekcie
Sekcia 4 Organická chémia				**Predsedajúci sekcie: Jiří Hanusek** miestnosť: Salónik KRISTAL
9:40	10:00	00:20	Prednáška	**Dávid Maliňák** Modifikované nukleofily reaktivující cholinesterasy inhibované organofosforovými sloučeninami: syntéza a biologická aktivita
10:00	10:20	00:20	Prednáška	**Vladimír Mastihuba** Diglykozidázy ako nástroj syntézy štruktúrovaných diglykozidov
10:20	10:40	00:20	Prednáška	**Lucia Pinčeková** Total synthesis of hemerocallisamine I paved by gram-scale synthesis of (2S,4S)-4-hydroxyglutamic acid lactone
10:40	11:00	00:20	Prestávka	Občerstvenie
11:00	11:20	00:20	Prednáška	**Dominika Valachová** SAR studies of novel macrocyclic antibiotic berkeleylactone A
11:20	11:50	00:30	Pozvaná prednáška v sekcii	**Ján Matyašovský** Príprava a využitie oligonukleotidov s terminálnou difosfátovou skupinou
11:50	12:10	00:20	Komerčná prednáška	**Zuzana Antalová (Merck Life Science)** Udržateľné riešenia pre chemické laboratóriá
12:00	14:00	02:00	Obed	Obed

14:00	**14:50**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Dušan Galusek** **Môže nám sklo pomôcť v boji proti baktériám rezistentným na antibiotiká?** miestnosť: Bellevue I
14:50	15:00	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivých sekcie
15:00	17:30	02:30	Prednášky	Prednášky v sekciách 1, 2 a 7
18:00	20:00	02:00	Večera	Večera
20:00	21:00	01:00	Diskusia	Diskusia členov SChemS a ČSCH o vzájomnej spolupráci, Salónik KRISTAL
20:00	23:00	03:00	Postery	Posterové prezentácie a pivný večer

(hod:min)	(hod:min)	(hod:min)		**Štvrtok, 7. september 2023**
Začiatok	**Koniec**	**Trvanie**	**Popis**	**Prezentujúci autor, názov prednášky**
8:30	**9:20**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Mária Mastihubová** **Prínos enzymatickej acylácie ku syntéze prírodných glykofenolík** miestnosť: Bellevue I
9:20	9:30	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivé sekcie
Sekcia 4 Organická chémia				**Predsedajúci sekcie: Marek Cigáň** miestnosť: Salónik SILVER
9:30	9:50	00:20	Prednáška	**Jiří Hanusek** Eschenmoserova reakce primárních thioamidů – kdy funguje a kdy nikoliv
9:50	10:10	00:20	Prednáška	**Martin Putala** Tandem arylation of binaphthyl by Suzuki coupling and C–H activation
10:10	10:30	00:20	Prednáška	**Branislav Ferko** Catalytic enantioselective nucleophilic desymmetrisation at P(V)
10:30	10:50	00:20	Prestávka	Občerstvenie
10:50	11:10	00:20	Prednáška	**Viktor Milata** 1,3,5-triazíny a ich synteticko-biologický potenciál
11:10	11:30	00:20	Prednáška	**Pavol Jakubec** Transformations of the synthetic chameleon
11:30	11:50	00:20	Prednáška	**Antonín Lyčka** ^{15}N NMR studie azo-hydrazo tautomerie v průmyslově vyráběných azobarvivech
12:00	14:00	02:00	Obed	Obed

14:00	18:00	04:00		Voľné poobedie
18:00	20:00	02:00	Večera	Večera
20:00	24:00	04:00		Slávnostný večierok, odovzdávanie ocenení, vyhodnotenie posterovej súťaže (Sála Grand Bellevue)

(hod:min)	(hod:min)	(hod:min)		**Piatok, 8. september 2023**
Začiatok	**Koniec**	**Trvanie**	**Popis**	
9:00	**9:50**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Karolina Schwarzová** **Borem dopovaný diamant: Perspektivy "netradičního" elektrodového materiálu po třiceti letech výzkumu** miestnosť: Bellevue I
9:50	10:00	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivé sekcie
Sekcia 4 Organická chémia				**Predsedajúci sekcie: Pavol Jakubec** miestnosť: Bellevue I
10:00	10:20	00:20	Prednáška	**Paula Fraňová** Stereoselective synthesis of indolizidine alkaloids from L-glutamic acid
10:20	10:40	00:20	Prednáška	**Michal Májek** Suflones and sulfoxides - the key to improved properties of tetrazines for bioorthogonal applications
10:40	11:00	00:20	Prednáška	**Marek Cigáň** Shed light on triarylhydrazone photoswitches
11:00	11:20	00:20	Prestávka	Občerstvenie
11:20	11:40	00:20	Prednáška	**Juraj Filo** Insights into the photoswitching behaviour of unsymmetrical benzothiazole-based dithienylethenes
11:40	12:00	00:20	Prednáška	**Lucie Kotásková** Syntéza a studium nových přepínačů na bázi hydrazonů a jejich modifikace stabilním radikálem
12:00	14:00	02:00	Obed	Obed

SEKCIA 5 VYUČOVANIE A HISTÓRIA CHÉMIE

(hod:min)	(hod:min)	(hod:min)		**Utorok, 5. septembra 2023**
Začiatok	**Koniec**	**Trvanie**	**Popis**	**Prezentujúci autor, názov prednášky**
09:00	09:30	00:30		Otvorenie zjazdu, kongresová sála Grand Hotel Bellevue
09:30	10:00	00:30		Príhovory hostí zjazdu
10:00	11:00	01:00	**Plenárna prednáška**	**Philipp Kukura** **Mass photometry: weighing molecules with light**
11:00	12:00	01:00		Ocenenia SChemS
12:00	14:00	02:00	Obed	Obed, Grand Hotel Bellevue
14:00	**14:50**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Milena Reháková** **Úloha chémie a materiálových analýz v procesoch ochrany kultúrneho dedičstva** miestnosť: Bellevue I
14:50	15:00	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivé sekcie
15:00	18:00	03:00	Prednášky	Prednášky v sekciách 1, 6 a 7
18:00	20:00	02:00	Večera	Večera, Grand Hotel Bellevue
20:00	23:00	03:00	Postery	Posterové prezentácie a vínny večer

(hod:min)	(hod:min)	(hod:min)		**Streda, 6. september 2023**
Začiatok	**Koniec**	**Trvanie**	**Popis**	**Prezentujúci autor, názov prednášky**
8:30	**9:20**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Zuzana Vargová** **Biologický potenciál koordinačných zlúčenín zinku a striebra** miestnosť: Bellevue I
9:20	9:30	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivé sekcie
9:30	12:00	02:30	Prednášky	Prednášky v sekciách 1, 3 a 4
12:00	14:00	02:00	Obed	Obed
14:00	**14:50**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Dušan Galusek** **Môže nám sklo pomôcť v boji proti baktériám rezistentným na antibiotiká?** miestnosť: Bellevue I
14:50	15:00	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivých sekcie

15:00	17:30	02:30	Prednášky	Prednášky v sekciách 1, 2 a 7
18:00	20:00	02:00	Večera	Večera
20:00	21:00	01:00	Diskusia	Diskusia členov SChemS a ČSCH o vzájomnej spolupráci, Salónik KRISTAL
20:00	23:00	03:00	Postery	Posterové prezentácie a pivný večer

(hod:min)	(hod:min)	(hod:min)		**Štvrtok, 7. september 2023**
Začiatok	**Koniec**	**Trvanie**	**Popis**	**Prezentujúci autor, názov prednášky**
8:30	**9:20**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Mária Mastihubová** **Prínos enzymatickej acylácie ku syntéze prírodných glykofenolík** miestnosť: Bellevue I
9:20	9:30	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivé sekcie
9:30	12:00	02:30	Prednášky	Prednášky v sekciách 1, 3 a 4
12:00	14:00	02:00	Obed	Obed
14:00	18:00	04:00		Voľné poobedie
18:00	20:00	02:00	Večera	Večera
20:00	24:00	04:00		Slávnostný večierok, odovzdávanie ocenení, vyhodnotenie posterovej súťaže (Sála Grand Bellevue)

(hod:min)	(hod:min)	(hod:min)		**Piatok, 8. september 2023**
Začiatok	**Koniec**	**Trvanie**	**Popis**	
9:00	**9:50**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Karolina Schwarzová** **Borem dopovaný diamant: Perspektivy "netradičního" elektrodového materiálu po třiceti letech výzkumu** miestnosť: Bellevue I
9:50	10:00	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivé sekcie
Sekcia 5 Vyučovanie a história chémie				**Predsedajúca sekcie: Katarína Kotuľáková** miestnosť: Salónik SILVER
10:00	10:20	00:20	Prednáška	**Viktor Milata** Vydavateľská činnosť Slovenskej chemickej spoločnosti od roku 1942 do roku 2023
10:20	10:40	00:20	Prednáška	**Martin Mucha** Chemie a další přírodní vědy na Slezskoostravském hradě – 17 let popularizace v Ostravě

10:40	11:00	00:20	Prednáška	**Dominika Koperová** Analýza faktorov úspechu v chemických výpočtoch: príčiny a dôvody výsledkov študentov 1. ročníka VŠ
11:00	11:20	00:20	Prestávka	Občerstvenie
11:20	11:40	00:20	Prednáška	**Katarína Kotuľáková** Chemické vzdelávanie v kontexte kurikulárnej reformy
11:40	12:00	00:20	Prednáška	**Ľubomír Held** Expedícia: včera alternatívne, zajtra bežné učebnice chémie
12:00	14:00	02:00	Obed	Obed

SEKCIA 6 APLIKOVANÁ CHÉMIA, ŽIVOTNÉ PROSTREDIE A POLYMÉRY

(hod:min)	(hod:min)	(hod:min)		**Utorok, 5. septembra 2023**
Začiatok	**Koniec**	**Trvanie**	**Popis**	**Prezentujúci autor, názov prednášky**
09:00	09:30	00:30		Otvorenie zjazdu, kongresová sála Grand Hotel Bellevue
09:30	10:00	00:30		Príhovory hostí zjazdu
10:00	11:00	01:00	**Plenárna prednáška**	**Philipp Kukura** **Mass photometry: weighing molecules with light**
11:00	12:00	01:00		Ocenenia SChemS
12:00	14:00	02:00	Obed	Obed, Grand Hotel Bellevue
14:00	**14:50**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Milena Reháková** **Úloha chémie a materiálových analýz v procesoch ochrany kultúrneho dedičstva** miestnosť: Bellevue I
14:50	15:00	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivé sekcie
15:00	15:10	00:10	Úvod	Otvorenie odborných sekcií - úvodné slová garantov
Sekcia 6 Aplikovaná chémia, životné prostredie a polyméry				**Predsedajúci sekcie: Radko Tiňo** miestnosť: Bellevue II
15:10	15:30	00:20	Prednáška	**František Kreps** Využitie fermentácie jablkových výliskov na zvýšenie obsahu polyfenolov
15:30	15:50	00:20	Prednáška	**Zuzana Krepsová** Využitie rakytníkovej šťavy na prípravu fermentovaných ovocných nápojov

15:50	16:10	00:20	Prednáška	**Martin Kolář** Využití monomerů z rostlinných olejů v syntéze akrylátových latexů pro lakařské aplikace
16:10	16:40	00:30	Prestávka	Občerstvenie
16:40	17:00	00:20	Prednáška	**Vojtěch Dobiáš** Tištěné indikátory pro chytré potravinové obaly
17:00	17:20	00:20	Prednáška	**Eliška Hrdá** Polymerní vektory na bázi diblokových hydrolyticky štěpitelných polykationtů pro doručování genů
17:20	17:40	00:20	Prednáška	**Radko Tiňo** Starnutie a možnosti ochrany polyuretánových materiálov v zbierkach kultúrneho dedičstva
18:00	20:00	02:00	Večera	Večera, Grand Hotel Bellevue
20:00	23:00	03:00	Postery	Posterové prezentácie a vínny večer

(hod:min)	(hod:min)	(hod:min)		**Streda, 6. september 2023**
Začiatok	**Koniec**	**Trvanie**	**Popis**	**Prezentujúci autor, názov prednášky**
8:30	**9:20**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Zuzana Vargová** **Biologický potenciál koordinačných zlúčenín zinku a striebra** miestnosť: Bellevue I
9:20	9:30	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivé sekcie
9:30	12:00	02:30	Prednášky	Prednášky v sekciách 1, 3 a 4
12:00	14:00	02:00	Obed	Obed
14:00	**14:50**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Dušan Galusek** **Môže nám sklo pomôcť v boji proti baktériám rezistentným na antibiotiká?** miestnosť: Bellevue I
14:50	15:00	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivých sekcie
15:00	17:30	02:30	Prednášky	Prednášky v sekciách 1, 2 a 7
18:00	20:00	02:00	Večera	Večera
20:00	21:00	01:00	Diskusia	Diskusia členov SChemS a ČSCH o vzájomnej spolupráci, Salónik KRISTAL
20:00	23:00	03:00	Postery	Posterové prezentácie a pivný večer

(hod:min)	(hod:min)	(hod:min)		**Štvrtok, 7. september 2023**
Začiatok	**Koniec**	**Trvanie**	**Popis**	**Prezentujúci autor, názov prednášky**
8:30	**9:20**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Mária Mastihubová** **Prínos enzymatickej acylácie ku syntéze prírodných glykofenolík** miestnosť: Bellevue I
9:20	9:30	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivé sekcie
9:30	12:00	02:30	Prednášky	Prednášky v sekciách 1, 3 a 4
12:00	14:00	02:00	Obed	Obed
14:00	18:00	04:00		Voľné poobedie
18:00	20:00	02:00	Večera	Večera
20:00	24:00	04:00		Slávnostný večierok, odovzdávanie ocenení, vyhodnotenie posterovej súťaže (Sála Grand Bellevue)

(hod:min)	(hod:min)	(hod:min)		**Piatok, 8. september 2023**
Začiatok	**Koniec**	**Trvanie**	**Popis**	
9:00	**9:50**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Karolina Schwarzová** **Borem dopovaný diamant: Perspektivy "netradičního" elektrodového materiálu po třiceti letech výzkumu** miestnosť: Bellevue I
9:50	10:00	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivé sekcie
Sekcia 6 Aplikovaná chémia, životné prostredie a polyméry				**Predsedajúci sekcie: Ivan Kelnar** miestnosť: Bellevue II
10:00	10:20	00:20	Prednáška	**Libor Dušek** Aplikace pokročilých oxidačních procesů do technologie úpravy a čištění procesních vod v modulární čistírně
10:20	10:40	00:20	Prednáška	**Jan Svoboda** Modifikované polymery: náplně kolon pro selektivní sorpce a reakce v průtočném uspořádán
10:40	11:00	00:20	Prednáška	**Eliška Matušková** Vybrané komplexy přechodných kovů využitelné jako katalyzátory pro vytvrzování nenasycených polyesterových pryskyřic
11:00	11:20	00:20	Prestávka	Občerstvenie
11:20	11:40	00:20	Prednáška	**Zuzana Frances Šimonová**

				Triethylamine as a highly efficient catalyst for the chemical imidization of polyimides
11:40	12:00	00:20	Prednáška	**Ivan Kelnar** Vliv typu a modifikací polysacharidových nanokrystalů na strukturu a vlastnosti nanokompozitu s matricí PCL/PLA
12:00	14:00	02:00	Obed	Obed

SEKCIA 7 CHEMPROGRESS - CHEMICKÉ TECHNOLÓGIE

(hod:min)	(hod:min)	(hod:min)		**Utorok, 5. septembra 2023**
Začiatok	**Koniec**	**Trvanie**	**Popis**	**Prezentujúci autor, názov prednášky**
09:00	09:30	00:30		Otvorenie zjazdu, kongresová sála Grand Hotel Bellevue
09:30	10:00	00:30		Príhovory hostí zjazdu
10:00	11:00	01:00	**Plenárna prednáška**	**Philipp Kukura** **Mass photometry: weighing molecules with light**
11:00	12:00	01:00		Ocenenia SChemS
12:00	14:00	02:00	Obed	Obed, Grand Hotel Bellevue
14:00	**14:50**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Milena Reháková** **Úloha chémie a materiálových analýz v procesoch ochrany kultúrneho dedičstva** miestnosť: Bellevue I
14:50	15:00	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivé sekcie
15:00	15:10	00:10	Úvod	Otvorenie odborných sekcií - úvodné slová garantov
Sekcia 7 Chemprogress – chemické technológie				**Predsedajúci sekcie: Ján Híveš** miestnosť: Salónik SILVER
15:10	15:30	00:20	Prednáška	**Michaela Plevová** Vliv předúpravy membrány a vodivosti katalyzátoru na výkon alkalické elektrolýzy vody s aniontově selektivní membránou
15:30	15:50	00:20	Prednáška	**Kateřina Hradečná** Polybenzimidazole based separator for alkaline membrane water electrolysis
15:50	16:10	00:20	Prednáška	**Karel Denk** Vliv typu separátoru na provoz alkalického elektrolyzéru vody při nízkých koncentracích kapalného elektrolytu
16:10	16:40	00:30	Prestávka	Občerstvenie

16:40	17:00	00:20	Prednáška	**Jana Záchenská** Viaczložkové Ni-Fe-W katalyzátory pre zero-gap alkalickú elektrolýzu vody
17:00	17:20	00:20	Prednáška	**Dita Hronová** Bifunčkní katalyzátory na bázi selenidů přechodných kovů pro použití v reverzibilních alkalických palivových článcích
17:20	17:50	00:30	Pozvaná prednáška v sekcii	**Roman Kodým** Studium dynamiky změn expanzních sil a rozměrů pilotního elektrodialýzního svazku
18:00	20:00	02:00	Večera	Večera, Grand Hotel Bellevue
20:00	23:00	03:00	Postery	Posterové prezentácie a vínny večer

(hod:min)	(hod:min)	(hod:min)		**Streda, 6. september 2023**
Začiatok	**Koniec**	**Trvanie**	**Popis**	**Prezentujúci autor, názov prednášky**
8:30	**9:20**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Zuzana Vargová** **Biologický potenciál koordinačných zlúčenín zinku a striebra** miestnosť: Bellevue I
9:20	9:30	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivé sekcie
9:30	12:00	02:30	Prednášky	Prednášky v sekciách 1, 3 a 4
12:00	14:00	02:00	Obed	Obed
14:00	**14:50**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Dušan Galusek** **Môže nám sklo pomôcť v boji proti baktériám rezistentným na antibiotiká?** miestnosť: Bellevue I
14:50	15:00	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivých sekcie
Sekcia 7 Chemprogress – chemické technológie				**Predsedajúci sekcie: Karel Denk** miestnosť: Salónik SILVER
15:00	15:20	00:20	Prednáška	**Jan Dismas Buriánek** Nové slitinové katylyzátory pro použití ve vysokoteplotních palivových článcích s protonově vodivou membránou
15:20	15:40	00:20	Prednáška	**Andrea Červenková** Korózia kovov v kontakte s materiálmi používanými pre skladovanie latentného tepla
15:40	16:00	00:20	Prednáška	**Roman Košťúr** Elektrochemické metódy na charakterizáciu modifikovaných tanátových vrstiev železných artefaktov

16:00	16:20	00:20	Prestávka	Občerstvenie
16:20	16:40	00:20	Prednáška	**Michaela Benköová** Sledovanie stability železanov
16:40	17:00	00:20	Prednáška	**Ján Híveš** Riešenie problému enviro-záťaže v Strážskom
17:00	17:20	00:20	Prednáška	**Ladislav Štibrányi** Polychlórované bifenyly Strážske - minulosť a súčasnosť
18:00	20:00	02:00	Večera	Večera
20:00	21:00	01:00	Diskusia	Diskusia členov SChemS a ČSCH o vzájomnej spolupráci, Salónik KRISTAL
20:00	23:00	03:00	Postery	Posterové prezentácie a pivný večer

(hod:min)	(hod:min)	(hod:min)		**Štvrtok, 7. september 2023**
Začiatok	**Koniec**	**Trvanie**	**Popis**	**Prezentujúci autor, názov prednášky**
8:30	**9:20**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Mária Mastihubová** **Prínos enzymatickej acylácie ku syntéze prírodných glykofenolík** miestnosť: Bellevue I
9:20	9:30	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivé sekcie
9:30	12:00	02:30	Prednášky	Prednášky v sekciách 1, 3 a 4
12:00	14:00	02:00	Obed	Obed
14:00	18:00	04:00		Voľné poobedie
18:00	20:00	02:00	Večera	Večera
20:00	24:00	04:00		Slávnostný večierok, odovzdávanie ocenení, vyhodnotenie posterovej súťaže (Sála Grand Bellevue)

(hod:min)	(hod:min)	(hod:min)		**Piatok, 8. september 2023**
Začiatok	**Koniec**	**Trvanie**	**Popis**	
9:00	**9:50**	**00:50**	**Pozvaná prednáška**	**Karolina Schwarzová** **Borem dopovaný diamant: Perspektivy "netradičního" elektrodového materiálu po třiceti letech výzkumu** miestnosť: Bellevue I
9:50	10:00	00:10	Presun	Presun z Bellevue I do miestností pre jednotlivé sekcie

10:00	12:00	02:00	Prednášky	Prednášky v sekciách 4, 5 a 6
12:00	14:00	02:00	Obed	Obed

CENA MARTY SALIŠOVEJ

(hod:min)	(hod:min)	(hod:min)		**Streda, 6. september 2023**
Začiatok	**Koniec**	**Trvanie**	**Popis**	**Prezentujúci autor, názov prednášky**
Cena Marty Sališovej				**Komisia zložená z členov SChemS a ČSCH** miestnosť: Bellevue I
9:30	9:40	00:10	Úvod	**Cena Marty Sališovej** - otvorenie a úvodné slová
9:40	10:00	00:20	Prednáška	**Nicolette Viktoryová** Development of an analytical method for monitoring selected bioplasticizers in water
10:00	10:20	00:20	Prednáška	**Zuzana Kovářová** Katalytická hydrogenace CO_2 na katalyzátorech typu oxidů kobaltu
10:20	10:40	00:20	Prednáška	**Michal Fulín** Analýza mastných kyselín s krátkym a stredne dlhým uhlikovým reťazcom v syroch pomocou GC-MS
10:40	11:00	00:20	Prestávka	Občerstvenie
11:00	11:20	00:20	Prednáška	**Romana Mičová** Pomalá magnetická relaxácia v jednojadrových Mn(II) komplexoch
11:20	11:40	00:20	Prednáška	**Katarína Cifraničová** Štúdium mikroštruktúry vzoriek na báze dimetakrylátu a vplyv variabilných parametrov na ich vlastnosti
11:40	12:00	00:20	Prednáška	**Andrea Pinkeová** Analýza glykánov ako diagnostický nástroj rakovinových ochorení
12:00	14:00	02:00	Obed	Obed
15:00	15:20	00:20	Prednáška	**Peter Čambal** Elektrochemické vlastnosti monokrystalických borem dopovaných diamantových elektrod s různými krystalovými orientacemi a jejich aplikace v elektroanalýze
15:20	15:40	00:20	Prednáška	**Kristýna Jelšíková** Studium elektrochemického chování primárních a sekundárních žlučových kyselin a jejich konjugátů
15:40	16:00	00:20	Prednáška	**Michal Zelenský** Polykrystalické borem dopované diamantové elektrody s kontrolovaným obsahem sp^2 uhlíku: spektrální a elektrochemická charakterizace
16:00	16:20	00:20	Prestávka	Občerstvenie

16:20	16:40	00:20	Prednáška	**Lucie Válková** Nanočástice ušlechtilých kovů v protinádorové fototermální terapii
16:40	17:00	00:20	Prednáška	**Daniel Dobrovodský** Elektrochemická detekcia DNA G-kvadruplexov pomocou N-metyl mesoporfyrínu ako redoxnej sondy
17:00	17:20	00:20	Prednáška	**Zuzana Bielková** Tetrakoordinované Co(II) komplexy zostavené z heterocyklických aromatických ligandov
17:20	17:40	00:20	Prednáška	**Terézia Laluhová** Fenomén teplotne indukovaného javu obrátenia spinu v komplexe železa(III)
18:00	20:00	02:00	Večera	Večera
20:00	23:00	03:00	Postery	Posterové prezentácie a pivný večer

ZOZNAM POSTEROV

UTOROK 5. 9. 2023

Sekcia 1 Analytická chémia

1Po01 Martin Adam, Eliška Trnková, Aleš Eisner
ANALÝZA BIOGENNÍCH AMINŮ V PIVECH METODOU MEPS-HPLC/UV

1Po02 Jana Bacova, Hanna Sopha, Jan Capek, Tomas Rousar, Jan M. Macak
WHITE AND BLACK ANODIC TiO_2 NANOTUBES: COMPARISON OF BIOLOGICAL EFFECTS IN NEURAL SH-SY5Y CELLS

1Po03 Martin Baroch, Hana Dejmková
MINIATURIZOVANÝ AMPEROMETRICKÝ DETEKTOR S KOVOVOU REFERENČNÍ ELEKTRODOU

1Po04 František Čacho, Jakub Masác
MULTIPRVKOVÁ ANALÝZA POMOCOU AAS SPEKTROMETRA

1Po05 Lucie Žaloudková, Vojtěch Hamala, Veronika Ostatná, Jindřich Karban, Aleš Daňhel
VOLTAMETRICKÉ CHOVÁNÍ FERROCENOVÝCH GLYKOMIMETIK A STUDIUM JEJICH INTERAKCE S GALEKTINEM-1 POMOCÍ ELEKTRODY Z PYROLYTICKÉHO GRAFITU

1Po06 Aleš Eisner, Martin Adam
STANOVENÍ PESTICIDŮ VE VODÁCH V REŽIMU MRM

1Po07 Daniel Haško
ZLEPŠENIE PRIESTOROVÉHO ROZLÍŠENIA LIBS URČOVANÍM ROZMEROV ABLAČNÝCH KRÁTEROV

1Po08 Alena Kelnarová, Eva Schlesingerová, Helena Pilátová
STANOVENÍ HMOTNOSTNÍ AKTIVITY VYBRANÝCH PŘÍRODNÍCH RADIONUKLIDŮ V POTRAVINÁCH

1Po09 Patrik Kopčan, Eva Kinnertová
STUDIUM POROZITY UHLÍKATÝCH MATERIÁLŮ POMOCÍ LOW-FIELD NMR RELAXOMETRIE

1Po10 Kateřina Krtková, Martin Mucha
VYUŽITÍ ADSORPCE NA MAGNETICKÝCH MATERIÁLECH PŘI PŘÍPRAVĚ VZORKŮ PŘÍRODNÍCH VOD KE STANOVENÍ STOPOVÝCH MNOŽSTVÍ IONTŮ TĚŽKÝCH KOVŮ

1Po11 Paras H. Kundalia, Lucia Pažitná, Kristína Kianičková, Eduard Jáné, Lenka Lorencová, Jaroslav Katrlík
MICROARRAY BIOSENSING IN GLYCOMICS ADOPTING 4D APPROACH

1Po12 Alica Várfalvyová, Barbora Benická, Elena Kupcová
FORENZNÁ APLIKÁCIA CHROMATOGRAFICKÉHO STANOVENIA BENZODIAZEPÍNOV

1Po13 Alena Manová, Kristína Vodičková, Miroslav Rusko
SELENIUM APPARENTLY HELPS AGAINST CORONAVIRUSES

Sekcia 2 Fyzikálna chémia

2Po01 Martin Bajcura, Miloš Lukáč, Martin Pisárčik
POVRCHOVÉ AKTIVITY PRÍRODNÝCH DERIVÁTOV KYSELINY OLEÁNOVEJ

2Po02 Zuzana Cibulková, Tibor Dubaj, Peter Šimon
DSC STUDY OF THERMOOXIDATIVE STABILITY OF LIGNOSULFONATE-FILLED RUBBER COMPOUNDS

2Po03 Jakub Copak, Michal Gulka, Ema Fialova, Maabur Sow, Raúl B. Gonzalez, Simon Lepleux, Fedor Jelezko, Petr Cigler
NANODIAMONDS WITH THERMORESPONSIVE POLYMERS FOR INTRACELLULAR THERMOMETRY

2Po04 Michal Hricovíni, Ondrej Cehlár, Rostislav Škrabana, Miloš Hricovíni
CONFORMATIONAL ANALYSIS OF THE TAU SEQUENCE 214SER-THR231 BY COMBINED MM AND QM METHODS

2Po05 Eva Noskovičová, Monika Jerigová, Vojtech Szocs, Dušan Velič, Katarína Koťuhová, Dušan Lorenc
REZONANČNE ZOSILNENÉ THZ-FWM VO FLUORIDOCH

Sekcia 3 Anorganická a materiálová chémia

3Po01 Barbora Doušová, Eva Bedrnová, Miloslav Lhotka, Lukáš Pilař, David Koloušek
PŘÍPRAVA A VYUŽITÍ KOMPOZITNÍCH SORBENTŮ Z ELEKTRÁRENSKÝCH POPÍLKŮ K ČIŠTĚNÍ ODPADNÍCH VOD

3Po02 Michal Gulka, Priyadharshini Balasubramanian, Ekaterina Shagieva, Josef Khun, Vladimir Scholtz, Fedor Jelezko, Stepan Stehlik, Petr Cigler
SURFACE OPTIMIZATION OF NANODIAMONDS USING NON-THERMAL PLASMA

3Po03 Zora Hajdúchová, Sára Jurašková, Marián Janek
VPLYV TEPLOTY SPEKANIA NA PEVNOSŤ V OHYBE HYDROXYAPATITOVEJ KERAMIKY PRIPRAVENEJ 3D TLAČOU

3Po04 Eva Kuzielová, Zora Hajdúchová, Matúš Žemlička, Jiří Másilko, Oľga Fričová
CHANGES OF CLASS G CEMENT PASTE INDUCED BY THE COMBINED EFFECT OF GEOTHERMAL WATER AND HIGH TEMPERATURE

3Po05 Eva Kuzielová, Zora Hajdúchová, Kristína Compeľová, Michal Slaný, Vladimír Pavlík
COMPARISON OF GEOTHERMAL WATER AND SODIUM CHLORIDE SOLUTION ACTION ON CEMENT PASTES UNDER AMBIENT CONDITIONS

3Po06 Michaela Harmošová, Mária Vilková, Martin Kello, Dominika Šebová, Erika Samoľová, Miroslava Litecká, Ivan Potočňák
KOMPLEXY Zr(IV) S DERIVÁTMI 8-HYDROXYCHINOLÍNU A ICH CYTOSTATICKÁ AKTIVITA

3Po07 Lucie Hochvaldova, Renáta Večeřová, Milan Kolář, Libor Kvítek, Aleš Panáček
ZKOUMÁNÍ ADAPTACE BAKTERIÍ NA ANTIMIKROBIÁLNÍ ÚČINKY NANOČÁSTIC STŘÍBRA

3Po08 Martina Kepeňová, Michaela Benediková, Miroslava Litecká, Ivan Potočňák
BIOLOGICKY AKTÍVNE PALÁDNATÉ KOMPLEXY ZLOŽENIA $NH_2(CH_3)_2[PdCl_2(XQ)]$

3Po09 Eva Kinnertová, Gabriela Zelenková, Lucie Kořená, Tomáš Zelenka, Václav Slovák
VLIV RYCHLOSTI OHŘEVU PŘI PYROLÝZE NA MEZOPOROZITU SOFT-TEMPLÁTOVANÝCH GELŮ

3Po10 Zdeňka Kolská, Simona Kamínková, Václav Švorčík
PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE NANOSTRUKTUROVANÝCH POVRCHŮ ROUBOVANÝCH ČÁSTICEMI PRO ANTIBAKTERIÁLNÍ VLASTNOSTI

3Po11 Lucie Kořená, Václav Slovák, Ana Arenillas, Samantha Lizette Flores López
VYUŽITÍ MIKROVLNNÉHO ZÁŘENÍ PŘI PŘÍPRAVĚ UHLÍKATÝCH XEROGELŮ

3Po12 Samuel Kowalczyk, Václav Slovák
VLIV RYCHLOSTI PRŮTOKU ATMOSFÉRY PŘI PYROLÝZE ORGANICKÝCH LÁTEK NA POROZITU VZNIKAJÍCÍCH UHLÍKATÝCH MATERIÁLŮ

3Po13 Dhiya Krishnan, Michal Korenko, František Šimko, Blanka Kubíková
THE PHASE EQUILIBRIA OF Na_3AlF_6–NdF_3 AND $(Na_3AlF_6–NdF_3)_{eut}$–Nd_2O_3 SYSTEM

3Po14 Jakub Kurjan, Mária Vilková, Miroslava Litecká, Ivan Potočňák
MEĎNATÉ KOMPLEXY DERIVÁTOV KUMARÍNU AKO POTENCIONÁLNE PROTIRAKOVINOVÉ ČINIDLÁ

3Po15 Klaudia Kvaková, Goutam Pramanik, Ondřej Pavelka, Jan Valenta, Petr Cígler
NEAR-INFRARED PHOTOLUMINESCENT GOLD NANOCLUSTERS

3Po16 Miloslav Lhotka, Barbora Doušova
URČENÍ TEXTURNÍCH CHARAKTERISTIK JÍLOVÝCH MINERÁLŮ

Sekcia 4 Organická chémia

4Po01 Tomáš Čičvák, Martin Putala
TVORBA C–C VÄZIEB POMOCOU C–H AKTIVÁCIÍ NA BIARYLOVÝCH SUBSTRÁTOCH

4Po02 Katarína Ráchel Detková, Branislav Ferko, Michaela Marčeková, Jana Doháňošová, Dušan Berkeš, Pavol Jakubec
VISIBLE-LIGHT-MEDIATED DENITRATIVE CROSS-COUPLING

4Po03 Lucia Feriancová, Ivana Císařová, Martin Kotora
SYNTHESIS OF NEW PERYLENE DERIVATIVES VIA RING-EXPANSION REACTION

4Po04 Ema Fialova, Jakub Copak, Jiri Schimer, Petr Cigler
BROMINATED DIAMOND SURFACE AS A REACTIVE INTERMEDIATE FOR FURTHER DERIVATIZATIONS

4Po05 Bedřich Formánek, Pavel Švec, Lenka Loukotová, Václav Vaněk, Anastasiia Priss, Veronika Aulichová, Silvia Petrezselyová, Andrea
Brázdová, Lenka Vaneková, František Sedlák, Petr Cígler, Klára Grantz Šašková
XMAN – VERSATILE LIPID NANOPARTICLES FOR NUCLEIC ACID DELIVERY

4Po06 Monika Garberová, Mária Vilková, Ivan Potočňák, Monika Tvrdoňová, Martina Bago-Pilátová, Zuzana Kudličková, Alexandra Kešeľáková, Ján Elečko
SYNTÉZA, ŠTRUKTÚRA A FARMAKOLIGICKÝ PROFIL N-ACYLHYDRAZÓNOV ODVODENÝCH OD PERILLALDEHYDU A MYRTENALU

4Po07 Tomáš Strhársky, Dominika Pindjaková, Jaroslava Jamrichová, Juliana Lavičková, Veronika Kadlecová, Jiří Kos, Tomáš Goněc, Josef Jampílek
SYNTÉZA AMIDŮ KYSELINY SKOŘICOVÉ S ANTIMIKROBIÁLNÍ AKTIVITOU

4Po08 Jana Hricovíniová, Renáta Vadkertiová, Zuzana Hricovíniová
Cu(II) COMPLEXES OF O,N,O-QUINAZOLINONE DONOR LIGANDS AS NEW BIOACTIVE COMPOUNDS

4Po09 Karolína Knittelová, David Malinak, Adela Fuchsova, Rudolf Andrys, Kamil Musilek
HALOGENATED PRALIDOXIME DERIVATIVES AS POTENTIAL REACTIVATORS OF INHIBITED CHOLINESTERASES: SYNTHESIS AND IN VITRO EVALUATION

4Po10 Zuzana Kohoutova, David Malinak, Rudolf Andrys, Marketa Neugebauerova, Miroslav Psotka, Kamil Musilek
NONSYMMETRICAL MONOQUATERNARY AMMONIUM SALTS AS POTENTIAL REACTIVATORS OF INHIBITED CHOLINESTERASES: SYNTHESIS AND IN VITRO EVALUATION

Sekcia 5 Vyučovanie a história chémie

5Po01 Lujza Grambličková, Monika Jerigová
CHEMICKÉ A ŠTRUKTÚRNE ZLOŽENIE RESPIRÁTOROV A ICH VPLYV NOSENIA NA ROZPOZNÁVANIE EMÓCIÍ ŽIAKOV ZÁKLADNÝCH ŠKÔL A GYMNÁZIÍ

5Po02 Zuzana Morávková, Jiří Havlíček, Rafael Doležal, Martin Bílek, Karel Kolář
NITRACE FENOLU V PŘÍTOMNOSTI MIKROVLN JAKO VÝUKOVÝ EXPERIMENT

Sekcia 6 Aplikovaná chémia, životné prostredie a polyméry

6Po01 Hana Burdová, Zdenka Kwoczynski, Diana Nebeská, Karim Suhail Al Souki, Dominik Pilnaj, Barbora Grycová, Kateřina Klemencová, Pavel Leštinský, Pavel Kuráň, Josef Trögl
DOES DIESEL CONTAMINATED SOIL AFFECT MISCANTHUS BIOMASS FOR FURTHER THERMAL UTILIZATION?

6Po02 Milan Bernauer, Kirill Iablochkin, Maryna Kantserova, Martin Zlámal, Vlastimil Fíla
MODELLING OF GLYPHOSATE SORPTION ON ACTIVATED CARBON

6Po03 Kirill Iablochkin, Milan Bernauer, Zdeněk Sofer, Vlastimil Fila
MIXED MATRIX MEMBRANES BASED ON 6FDA-BisP FOR BIOGAS PURIFICATION

6Po04 Veronika Jančíková, Michal Jablonský
STANOVENIE ACIDITY V SYSTÉMOCH OBSAHUJÚCICH CHOLÍN CHLORID, KYSELINU MLIEČNU A DIOLY

6Po05 David Pavel Královič, Katarína Cifraničová, Ondrej Šauša, Helena Švajdlenková
ŠTÚDIUM MIKROŠTRUKTURÁLNYCH VLASTNOSTÍ VYTVRDENÉHO BISFENOLU A DIGLYCIDYLÉTERU POMOCOU FRONTÁLNEJ POLYMERIZÁCIE

6Po06 Olga Krupková, Libor Dušek
DEGRADATION OF TEXTILE DYES FROM WASTEWATER BY OXIDATION PROCESSES

6Po07 Gabriela Kuchtová
VYUŽITIE ZHÁŠAČOV K CHARAKTERIZÁCII ELEKTRÓD

6Po08 Miloš Lukáč, Martin Bajcura, Martin Pisárčik
ŠTÚDIUM EKOTOXICITY XENOBIOTÍK NA VYBRANÝCH RIASACH A KÔROVCOCH

6Po09 Jana Macháčková, Marie Nevyhoštěná, Kevin Matzick, Alena Komersová
DEVELOPMENT OF FILAMENTS FOR FDM 3D PRINTING OF ORAL SOLID DOSAGE FORMS

6Po10 Frederika Mišíková, Anna Krejčová, Jan Patočka
ANTROPOGENNÍ GADOLINIUM VSTUPUJÍCÍ DO POTRAVNÍHO REŤEZCE

Sekcia 7 Chemprogress – chemické technológie

7Po01 Miroslav Hala, Roman Kodým, Martin Prokop, Martin Paidar, Karel Bouzek
MATEMATICKÉ MODELOVÁNÍ VLIVU GEOMETRIE KANÁLU PRO PROUDĚNÍ PLYNŮ LISOVANÝCH KOVOVÝCH BIPOLÁRNÍCH DESEK NA VÝKON PEM PALIVOVÉHO ČLÁNKU

7Po02 Libor Mastný, Miloslav Lhotka
LIKVIDACE ODPADŮ Z VÝROBY TŘASKAVIN

STREDA 6. 9. 2023

Sekcia 1 Analytická chémia

1Po14 Martina Machalová, Michaela Vašinová Galiová, Tibor Stračina
LA-ICP-MS IN MEDICAL RESEARCH

1Po15 Ján Labuda, Veronika Svitková
ANALYTICKÁ CHARAKTERIZÁCIA NANOMATERÁLOV VO VZORKÁCH SO ZLOŽITOU MATRICOU

1Po16 Alice Markvartová, Jiří Widimský jr., Tomáš Zelinka, Jan Škrha sr., Michal Vrablík
STANOVENÍ KATECHOLAMINŮ A METANEFRINŮ Z TĚLNÍCH TEKUTIN V DIAGNOSTICE FEOCHROMOCYTOMU A PARAGANGLIOMU

1Po17 Jakub Masác, František Čacho
STANOVENIE JODIDOV VO VZORKÁCH VÔD S VYSOKÝM OBSAHOM CHLORIDOV

1Po18 Oleksandr Matvieiev, Renáta Šelešovská, Marian Vojs, Pavlína Kelíšková, Lenka Janíková, Jaromíra Chýlková
ELECTROCHEMICAL IMPEDANCE SPECTROSCOPY FOR THE QUANTITATIVE DETERMINATION OF DRUGS

1Po19 Ondřej Pařízek
ROZKLAD PEVNÝCH VZORKŮ POMOCÍ AUTOMATICKÉ TAVIČKY KATANAX

1Po20 Denis Pavelek, Radoslav Halko
VPLYV ROZPÚŠŤADIEL A ICH ELIMINÁCIA V KVAPALINOVEJ CHROMATOGRAFII V SPOJENÍ S INFRAČERVENOU SPEKTROMETRIOU NA IDENTIFIKÁCIU LÁTOK

1Po21 Lucie Pražáková, Jan Fischer, Anna Kubíčková
NOVÝ PŘÍSTUP K OXIDACI LÉČIV

1Po22 Veronika Silliková, Jana Jakubčinová, Silvia Dulanská
RAPID DETERMINATION OF ^{226}Ra USING A MODIFIED SORBENT

1Po23 Marek Zelinka, Peter Šebest, Veronika Ostatná, Aleš Daňhel
ELEKTROCHEMICKÁ DETEKCE INTERAKCE GALEKTÍNU A JEHO GLYKOMIMETIK

1Po24 Darina Tóthová, Tomáš Cincula, Michal Galamboš
RÁDIOFARMAKA S OBSAHOM JÓDU – VYUŽITIE RÁDIOANALYTICKÝCH METÓD PRI ICH KONTROLE KVALITY

1Po25 Lucia Vráblová, Renáta Górová, Helena Jurdáková
ÚPRAVA VZORKY SMOLKY PRE ĽUDSKÝ BIOMONITORING METABOLITOV PLASTIFIKÁTORA DINCH

1Po26 Eva Novotná, Lucie Čermáková, Lenka Laštovičková, Vladimír Wsól
ALDO-KETO REDUCTASE 1C3 AS A NOVEL OFF-TARGET FOR THE BRUTON′S TYROSINE KINASE INHIBITOR TIRABRUTINIB

1Po27 Lenka Lorencová, Veronika Pinková Gajdošová, Štefánia Hrončeková, Juvissan Aguedo, Tomáš Bertók, Peter Kasák, Ján Tkáč
2D MXENE COMPOSITES BASED INTERFACES FOR ULTRASENSITIVE CANCER BIOMARKERS NANOBIOSENSING

Sekcia 2 Fyzikálna chémia

2Po06 Jarmila Mlynáriková, Miroslav Boča, Blanka Kubíková
VOLUME PROPERTIES OF THE MOLTEN SYSTEMS MF ─ K_2ZrF_6 (MF = LiF; NaF and KF)

2Po07 Eva Noskovičová, Monika Jerigová, Vojtech Szöcs, Dušan Velič, Justína Nováková, Simon Fleming, Alessandro Tuniz, Dušan Lorenc
3D TLAČENÝ THz FOTONICKÝ PRIETOKOVÝ SENZOR PRE DETEKCIU NEBEZPEČNÝCH PLYNOV

2Po08 Dominik Sarvaš, Eva Noskovičová, Dušan Lorenc
STANOVENIE ÚČINNÉHO PRIEREZU DVOJFOTÓNOVEJ ABSORPCIE METÓDOU Z-SCAN

2Po09 Peter Šimon, Tibor Dubaj, Zuzana Cibulková
KINETIC COMPENSATION EFFECT IN SIMPLE AND COMPLEX PROCESSES

2Po10 Miriama Šimunková, Marek Štekláč, Michal Malček, Martin Kemény, Renáta Raptová, Marián Valko
EFFECT OF Cu(II) ON THE BIOCHEMICAL PROPERTIES OF SELECTED POLYPHENOLS: THEORY VS. EXPERIMENT

2Po11 Stanislav Kozmon, Barbora Stratilová
EXPLORING A4B1 INTEGRIN-POLYPEPTIDIC LIGAND INTERACTIONS THROUGH IN SILICO METHODS

2Po12 Justína Nováková, Vojtech Szöcz, Dušan Lorenc, Monika Jerigová, Martin Baláž
TRIEDENIE HMOTNOSTNÝCH SPEKTIER UHLÍKATÝCH CHONDRITOV PODĽA STUPŇA PREMENY POMOCOU PCA

Sekcia 3 Anorganická a materiálová chémia

3Po17 Lenka Loukotová, Olha Lytvynenko, Jiří Schimer, Petr Cígler
STABILIZED GOLD NANOPARTICLES BY POLYDIACETYLENES

3Po18 František Šimko, Zuzana Netriová, Aydar Rakhmatullin, Michal Korenko
CESIUM FLUORO–, OXO– AND OXO–FLUORO–ALUMINATES: SYNTHESIS, AND THEIR STABILITY

3Po19 Ales Panacek, Lucie Hochvaldova, Martin Mistrik, Zdenek Skrott
PLASMONIC SILVER NANOLAYERS-MODIFIED SURFACES FOR MICROTHERMAL-INDUCED SUBCELLULAR-TARGETED PROTEIN DAMAGE IN CELLS

3Po20 Radka Pocklanová, Jan Stehlík, Aneta Bužková, Aleš Panáček, Robert Prucek, Libor Kvítek
CONTROLLING ULTRASMALL GOLD NANOPARTICLES: IMPORTANCE OF SIZE AND STRUCTURE FOR THE STUDY OF CATALYTIC ACTIVITY

3Po21 Marie Pražáková, Bohuslav Drahoš
DESIGN AND SYNTHESIS OF POLYDENTATE PYCLEN-BASED LIGAND SUITABLE FOR COMPLEXATION OF MANGANESE(II) AND OTHER (BIOLOGICALLY) RELEVANT METAL IONS

3Po22 Robert Prucek, Karolína Zrníková, Aneta Bužková
PŘÍPRAVA NANOKOMPOZITU OXIDU ŽELEZA A NANOČÁSTIC KOBALTU PRO APLIKACI DEGRADACE ETHINYLESTRADIOLU

3Po23 Jakub Siegel, Jana Pryjmaková, Daniel Grossberger
VLIV MORFOLOGIE POLYMERU NA UKOTVENÍ STŘÍBRNÝCH NANOČÁSTIC METODOU LIFT

3Po24 Petr Slepička, Dominik Fajstavr, Nikola Slepičková Kasálková, Bára Frýdlová
REPLIKACE BIOPOLYMERU PLLA A JEHO ANTIBAKTERIÁLNÍ VLASTNOSTI

3Po25 Nikola Slepičková Kasálková, Jakub Siegel, Jana Pryjmaková, Petr Slepička
PŘÍPRAVA Au A Cu NANOSTRUKTUR NA PERIODICKY VZOROVANÉM PEN PRO BIOAPLIKACE

3Po26 Antonín Sojka, Jan Zich, Jiří Navrátil, Ludvík Beneš, Tomáš Plecháček, Čestmír Drašar
Bi_2O_2Se THERMOELECTRIC PROPERTIES COMPARISON STUDY

3Po27 Barbora Štefková, Robert Prucek, Tomáš Ingr
SONOCHEMICKÁ PŘÍPRAVA VRSTEV NANO A SUBMIKRONOVÝCH ČÁSTIC STŘÍBRA PRO DETEKCI LÁTEK POMOCÍ POVRCHEM ZESÍLENÉ RAMANOVY SPEKTROSKOPIE

3Po28 Anna Zabelina, Denis Zabelin, Zdeňka Kolská, Oleksiy Lyutakov, Václav Švorčík
FOTOINDUKOVANÁ KONVERZE CO_2 ZA ARKTICKÝCH PODMÍNEK

3Po29 Svitlana Vitushkina, Juraj Kuchár, Veronika Kuchárová
STUDY OF PREPARATION AND CHARACTERIZATION OF ORGANIC PRECURSORS OF SINGLE-MOLECULE MAGNETS BASED ON 3d/4f METALS

3Po30 Jana Vyhlídalová, Tomáš Zelenka, Aleš Badač, Miroslav Almáši
KOMPOZITNÍ MOF-UHLÍKATÉ MATERIÁLY PRO SORPCI VODÍKU

3Po31 Eva Zahradníková, Céline Pichon, Jean-Pascal Sutter, Radovan Herchel, Petr Halaš, Bohuslav Drahoš
PYRIDINE-BASED MACROCYCLIC LIGANDS: SYNTHESIS OPTIMIZATION, COMPLEX PREPARATION AND THEIR ROLE IN THE FILED OF MOLECULAR MAGNETISM

3Po32 Gabriela Zelenková, Tomáš Zelenka, Miroslav Almáši, Michala Soldánová
GRAPHENE AS A PROMISING ADDITIVE TO HIERARCHICALLY POROUS CARBON MONOLITHS FOR ENHANCED H_2 AND CO_2 SORPTION

Sekcia 4 Organická chémia

4Po11 Adéla Šimková, Enikő Šikorová, Šárka Štěpánková, Klára Konečná, Ondřej Janďourek, Jarmila Vinšová, Martin Krátky
SYNTÉZA A BIOLOGICKÁ AKTIVITA NOVÝCH DERIVÁTŮ RHODANINU A THIAZOLIDIN-2,4-DIONU

4Po12 Olha Lytvynenko, Václav Vaněk, Anastasiia Priss, Klára Grantz Šašková, Petr Cígler
DETERMINATION OF pK_a OF ADAMANTANE-BASED LIPID NANOPARTICLES

4Po13 Dušan Bortňák, Daniel Végh, Branislav Pavílek, Viktor Milata
INDUKOVANÉ ŠTIEPENIE N-N A C-F VÄZIEB AROMATICKÝCH PERFLUÓROVANÝCH HYDRAZÓNOV - NOVÁ METÓDA SYNTÉZY AROMATICKÝCH A HETEROAROMATICKÝCH NITRILOV A 2,3,5,6-TETRAFLUÓRANILÍNU

4Po14 Miroslav Psotka, Zuzana Kohoutova, Karolina Knittelova, David Malinak, Rudolf Andrys, Kamil Musilek, Stanislav Gobec
SYNTHESIS OF NOVEL COMPOUNDS TARGETING NEUROINFLAMMATION AND CHOLINERGIC DEFICIT IN ALZHEIMER´S DISEASE

4Po15 Karin Schniererová, Henrieta Stankovičová, Martin Putala
C(2)-REGIOSELEKTÍVNA PRIAMA ARYLÁCIA CHROMÓNOV

4Po16 Klára Stankovianska, Mária Mečiarová, Radovan Šebesta
FLUÓROVANÉ PYRÁNY AKO POTENCIÁLNE BIOLOGICKY AKTÍVNE LÁTKY

4Po17 Markéta Svobodová, Eliška Smejkalová, Nikol Švábková
SYNTÉZA BOROVÝCH HETEROCYKLŮ VYCHÁZEJÍCÍ Z BIS(ENAMINOAMIDŮ)

4Po18 Jana Špaková Raschmanová, Martin Fábian, Miroslava Martinková, Adam Sudzina, Martina Bago Pilátová
TOTÁLNA SYNTÉZA NOVÝCH PYROLIDÍNOVÝCH SFINGOMIMETÍK

4Po19 Iveta Uhliariková, Mária Matulová, Jaromír Lukavský, Jozef Turjan, Peter Capek
STRUCTURE OF EXOPOLYSACCHARIDE PRODUCED BY CYANOBACTERIA NOSTOC cf. LINCKIA

4Po20 Monika Tvrdoňová, Yuliia Zuzak
STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA NOVÝCH BROUSSONETÍNOVÝCH ANALÓGOV

Sekcia 5 Vyučovanie a história chémie

5Po3 Radana Koudelíková, Pavel Štarha
MULTIMEDIÁLNÍ VZDĚLÁVÁNÍ V CHEMII

5Po4 Zuzana Vargová
PROFIL A ŠTUDIJNÝ PLÁN ABSOLVENTA NOVÉHO PROFESIJNE ORIENTOVANÉHO ŠTUDIJNÉHO PROGRAMU „CHEMICKÝ LABORANT - ŠPECIALISTA“

Sekcia 6 Aplikovaná chémia, životné prostredie a polyméry

6Po11 Walid Moussa, Vladimír Puchart
RELATIONSHIP BETWEEN THE STRUCTURE-BASED CLASSIFICATION AND SUBSTRATE SPECIFICITY OF α-L-ARABINOFURANOSIDASES

6Po12 Viktorie Neubertová, Václav Švorčík, Zdeňka Kolská
ROOM TEMPERATURE SYNTHESIS AND AMINE-FUNCTIONALIZATION OF ZIF-8 FOR ENHANCED CO_2 CAPTURE

6Po13 Marie Nevyhoštěná, Alena Komersová, Jana Macháčková, Vladimír Pejchal, Šárka Štěpánková
DISSOLUTION TESTING OF NEW POTENTIAL DRUGS FOR ALZHEIMER'S DISEASE

6Po14 Alžběta Parchaňská
PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE PORÉZNÍCH UHLÍKATÝCH MONOLITŮ NA BÁZI CELULÓZY

6Po15 Michal Pechar, Robert Pola, Marina Rodrigues Tavares, Kaplan Kirakci, Tomáš Přibyl, Jaroslav Zelenka, Tomáš Ruml, Kamil Lang, Tomáš Etrych

HYDROPHILIC POLYMER CONJUGATES WITH OCTAHEDRAL MOLYBDENUM CLUSTERS: POTENTIAL NANOMATERIALS FOR PHOTODYNAMIC THERAPY

6Po16 Lucie Sedláčková, Aleš Franc, Sylvie Pavloková

PŘÍPRAVA A HODNOCENÍ OBALOVACÍCH SMĚSÍ PRO SUCHÉ OBALOVÁNÍ LÉKOVÝCH MIKROFOREM S ŘÍZENÝM UVOLŇOVÁNÍM

6Po17 Hana Španielová, Jitka Neburková, Jan Bartoň, Petr Cígler

FLUORESCENT NANODIAMONDS MODIFIED WITH HYALURONIC ACID FOR TARGETED CANCER CELL THERANOSTICS

6Po18 Martin Veselý, Jan Elbl, David Záruba

3D TISK INDIVIDUALIZOVANÉ LÉKOVÉ FORMY

6Po19 Martin Zlámal, Karel Pecha, Zoran Zwaan

SEPARACE VYBRANÝCH MIKROPOLUTANTŮ Z VODY S RŮZNOU SOLNOSTÍ POMOCÍ NANOFILTRACE

6Po20 Hana Dvořáková, Jan Čech, Monika Stupavská, Lubomír Prokeš, Jana Jurmanová, Vilma Buršíková, Jozef Ráheľ, Pavel Sťahel

FAST SURFACE HYDROPHILIZATION VIA ATMOSPHERIC PRESSURE PLASMA POLYMERIZATION FOR BIOLOGICAL AND TECHNICAL APPLICATIONS

Sekcia 7 Chemprogress – chemické technológie

7Po03 Ivona Sedlářová, Petr Lodňánek, Martin Zlámal, Jan Vídenský

STUDIUM OXIDACE ŽELEZNATÝCH IONTŮ VZDUCHEM

7Po04 Renáta Števuľová, Kamil Kerekeš, Ján Híveš

ŽELEZANY – ELEKTROCHEMICKÁ PRÍPRAVA

7Po05 Jaroslav Bruncko, Katarína Koťuhová, Miroslav Michalka, Monika Jerigová

PULZNÁ LASEROVÁ DEPOZÍCIA KOVOVÝCH VRSTIEV