

## 59. ZJAZD CHEMIKOV

2. – 6. september 2007

Vysoké Tatry, Tatranské Matliare, hotelový komplex Hutník

### USPORIADAJÚCE ORGANIZÁCIE



Asociácia slovenských chemických  
a farmaceutických spoločností



Asociace českých chemických společností

### HLAVNÝ ORGANIZÁTOR

Slovenská chemická spoločnosť



### ČESTNÉ PREDSEDNÍCTVO

Vladimír Bálež – predseda SSCHI  
Jozef Čižmárik – predseda SFS  
Jozef Kollár – predseda ASCHFS  
Viktor Milata – predseda SCHS  
Miloš Revús – predseda SSPCH  
Ján Turňa – predseda SSBMB  
Karel Ventura – predseda AČCHS

### ORGANIZAČNÝ VÝBOR

Dušan Velič – predseda  
Monika Aranyosiová – výkonná tajomníčka  
Viktor Milata – vedecký tajomník  
Pavel Drašar – vedecký tajomník  
Zuzana Hloušková – hospodárka  
Miroslav Michalka – technické zabezpečenie

## PROGRAMOVÝ VÝBOR

Doc. RNDr. Magdaléna Bálintová, PhD. – TU, KE  
Prof. Dr. h. c. Daniel Belluš – SCHS, BA  
Doc. RNDr. Ján Benko, CSc. – UK, BA  
Doc. Ing. Dušan Berek, DrSc. – SCHS, BA  
Prof. Ing. Stanislav Biskupič, DrSc. – STU, BA  
Prof. Ing. Vlasta Brezová – SCHS, BA  
Prof. RNDr. Jozef Čársky, CSc. – UK, BA  
RNDr. Milan Drábik, PhD. – SCHS, BA  
Prof. Ing. Ľubor Fišera, DrSc. – STU, BA  
Prof. Dr. h. c. Karol Florián, DrSc. – SCHS, KE  
Doc. RNDr. Mária Ganajová, CSc. – UPJŠ, KE  
Doc. RNDr. Taťána Gondová, CSc. – UPJŠ, KE  
RNDr. Dalma Gyepesová, CSc. – SCHS, BA  
Ing. Ján Hirsch, DrSc. – SAV, BA  
Doc. RNDr. Oľga Hritzová, CSc. – UPJŠ, KE  
Prof. RNDr. Dušan Kaniansky, DrSc. – UK, BA  
Prof. RNDr. Vladimír Kellö, DrSc. – SCHS, BA  
Ing. Elena Kulichová – SPŠCH, NO  
Doc. RNDr. Jozef Kuruc, PhD. – UK, BA  
Prof. Ing. Ján Labuda, DrSc. – STU, BA  
Doc. RNDr. Ladislav Lux, CSc. – TU, KE  
Ing. Mária Omastová, PhD. – SAV, BA  
Doc. Ing. Ladislav Petruš, DrSc. – SCHS, BA  
Doc. RNDr. Martin Putala, PhD. – UK, BA  
Doc. RNDr. Mária Reháková, CSc. – UPJŠ, KE  
Prof. Ing. Milan Remko, DrSc. – UK, BA  
Prof. MUDr. Viktor Romančík, DrSc. – SSPCH  
Doc. RNDr. Marta Sališová, CSc. – SCHS, BA  
Doc. Ing. Štefan Schmidt, PhD. – STU, BA  
Prof. RNDr. Peter Silný, CSc. – UK, BA  
Prof. Ing. Peter Šimon, DrSc. – STU, BA  
Prof. RNDr. Nadežda Številová, PhD. – TU, KE  
Doc. Ing. Igor Šurina, CSc. – STU, BA  
Prof. Ing. Dr. Jozef Tomko, DrSc. – SCHS, BA  
PaeDr. Anna Tóthová, PhD. – SCHS, BA

## PROGRAM 59. ZJAZDU CHEMIKOV

### Nedeľa 2. 9. 2007

- 09:00 – 18:00 Registrácia účastníkov, recepcia II  
14:00 – 17:00 Organizovaný odvoz autobusmi zo železničnej stanice Poprad  
19:00 – 24:00 Uvítací večierok

### Pondelok 3. 9. 2007

- 08:30 – 09:00 Odvoz autobusmi z hotelového komplexu Hutník do Tatranskej Lomnice, kino Tatry  
09:00 – 09:45 Otvorenie zjazdu, kino Tatry  
09:45 – 10:30 Plenárna prednáška Prof. Ertla  
10:30 – 12:00 Príhovory primátora Ing. J. Mokoša, ministra hospodárstva Doc. Ľ Jahnátka, zástupcov sponzorov, predstaviteľov chemických spoločností a asociácií a funkcionárov SAV a fakúlt s chemickým profilom  
12:00 – 12:30 Valné zhromaždenie SCHS, kino Tatry  
12:30 – 13:25 Obed v hotelovom komplexe Hutník, prvý turnus  
13:25 – 14:20 Obed v hotelovom komplexe Hutník, druhý turnus  
14:20 – 18:00 Prednášky v sekciách, príprava posterov  
18:00 – 19:00 Večera v hotelovom komplexe Hutník, prvý turnus  
19:00 – 20:00 Večera v hotelovom komplexe Hutník, druhý turnus  
20:00 – 24:00 Posterové prezentácie, hotelový komplex Hutník - telocvičňa, vínný večer

### Utorok 4. 9. 2007

- 08:30 – 12:00 Prednášky v sekciách, príprava posterov  
12:00 – 13:25 Obed v hotelovom komplexe Hutník, prvý turnus  
13:25 – 14:00 Obed v hotelovom komplexe Hutník, druhý turnus  
14:00 – 18:00 Výlety  
18:00 – 19:00 Večera v hotelovom komplexe Hutník, prvý turnus  
19:00 – 20:00 Večera v hotelovom komplexe Hutník, druhý turnus  
20:00 – 24:00 Posterové prezentácie, hotelový komplex Hutník - telocvičňa, pivný večer

### Streda 5. 9. 2007

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

### Štvrtok 6. 9. 2007

- 08:30 – 11:05 Prednášky v sekciách  
11:05 – 12:00 Panelová diskusia  
12:00 – 14:00 Obed v hotelovom komplexe Hutník  
14:00 Odchod

## SEKCIE ZJAZDU A GARANTI

### 1. Analytická a fyzikálna chémia

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

*Prof. Ing. Peter Šimon, DrSc.*

Ústav fyzikálnej chémie a chemickej fyziky, FCHPT STU, Bratislava

### 2. Anorganická a materiálová chémia

(Anorganická chémia, Chémia materiálov, Íly, Nanotechnológia, Mechanochemia, Úprava povrchov, Biomateriály)

*Prof. Ing. Marián Koman, DrSc.*

Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov, FCHPT STU, Bratislava

### 3. Organická chémia a polyméry

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

*Ing. Mária Omastová, CSc.*

Ústav polymérov, SAV, Bratislava

### 4. Vyučovanie a história chémie

(Vyučovanie chémie, História chémie, Prezentácia chémie verejnosti, Chemická informatika)

*Prof. RNDr. Jozef Čársky, DrSc.*

Lekárska fakulta, Univerzita Komenského, Bratislava

*Prof. RNDr. Peter Silný, CSc.*

Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Bratislava

### 5. Potravinárstvo, životné prostredie a biotechnológia

(Potravinárska chémia, Životné prostredie, Biotechnológia, Biochémia, Toxikológia, Rádioekológia, Molekulárna biológia)

*Doc. Ing. Štefan Schmidt, CSc.*

Ústav biotechnológie a potravinárstva, FCHPT STU, Bratislava

### 6. CHEMPROGRESS

(Priemyselné inžinierstvo, Technológie, Prepojenie vedy a priemyslu)

*Prof. Ing. Vendelín Macho, DrSc.*

Fakulta priemyselných technológií, Trenčianska univerzita, Púchov

## ZOZNAM POZVANÝCH PREDNÁŠOK

- PP1** Adam Pron Organic-Inorganic Hybrid Materials for Molecular Electronics
- PP2** Anton Blažej Biologizácia chemických technológií v 21. storočí
- PP3** Petr Štěpnička Coordination and Catalytic Behaviour of Ferrocene Alkenylphosphines
- PP4** Ján Šajbidor Úloha polynenasýtených mastných kyselín v prevencii niektorých civilizačných ochorení
- PP5** Ján Mocák Možnosti charakterizácie a klasifikácie údajov chemometrickými technikami
- PP6** Martin Polčík Bionanotechnology project at ANF DATA
- PP7** Pavol Šajgalík Polymer Derived Silicon Carbide Ceramics
- PP8** Karol Babor 60 rokov Chemických zvestí - Chemical Papers

## Pozvané prednášky

### ORGANIC-INORGANIC HYBRID MATERIALS FOR MOLECULAR ELECTRONICS

A. PRON<sup>1</sup>, G. DEGIROLAMO<sup>2</sup>, R. PROKOP<sup>3</sup>, P. REISS<sup>2</sup>, M. ZAGORSKA<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Commisariat

<sup>2</sup>CEA Grenoble

<sup>3</sup>Warsaw University of Technology

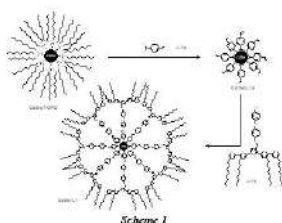
Korešpondenčný autor: adam.pron@cea.fr

Preparation and characterization of new hybrids consisting of A(II)B(VI) monodispersed nanocrystals and conjugated oligo and polythiophenes will be presented. These materials can be used as components of organic or molecular electronics devices such as ambipolar transistors or photovoltaic cells. The principal problem in the preparation of such inorganic-organic hybrids is strong phase separation caused by distinctly different chemical nature of both components of the hybrid. Two techniques are used to prepare true molecular hybrids showing ordered supramolecular organization with uniform distribution of both components.

i) grafting of both components by the intermediate of a specially designed bifunctional nanocrystal ligand containing an anchoring group and a reactive end capable of reacting with functionalized oligo- or polythiophene (see *Scheme 1*).

ii) molecular recognition between appropriately functionalized oligo- or polythiophene and nanocrystals ligands, as shown in *Scheme 2* where thymine functionalized nanocrystals' ligands form a triple hydrogen bond with oxydiaminopyrimidine functionalized polythiophene.

Structural, spectroscopic, electronic and electrochemical properties of both types of hybrids will be discussed as well as their application to the fabrication of electronic devices.



### BIOLOGIZÁCIA CHEMICKÝCH TECHNOLOGIÍ V 21. STOROČÍ

A. BLAŽEJ

Trenčianska Univerzita Alexandra Dubčeka v Trenčíne

Korešpondenčný autor: Marek.cepa@zoznam.sk

V súvislosti s vysokým stupňom chemického znečistenia životného prostredia v dôsledku chemického priemyslu, dopravy a energetiky bude žiaduce nahradzovať tradičné chemické procesy, chemikálie a syntetické materialy, biologickými procesmi, biochemikáliami a biomaterialmi. Stupeň chemického znečistenia životného prostredia priniesol globálne problémy, ako sú klimatické zmeny, úbytok ozónu v ozónovej vrstve a kyslé dažde. Tieto dôsledky stimulovali potrebu vývoja nových technologických procesov, nových materialov a palív, ktoré by prispeli významne k zlepšeniu kvality životného prostredia a znižovaniu úbytku biodiverzity. Jednou z možností reálnych východísk je rozvoj biologických procesov, nástup biologizácie národného hospodárstva biotechnológie, biomateriály, biopalivá) a vytvorenie podmienok pre udržateľný rozvoj. V prednáške bude hlavná pozornosť venovaná obnoviteľným zdrojom, surovinám, biotechnológii, biomaterialom a biopalivám.

## Prednášky – sekcia 1

### TERMODYNAMICKÉ VLASTNOSTI Cr<sub>2</sub>GaN A Cr<sub>3</sub>GaN A VÝPOČET FÁZOVÝCH DIAGRAMŮ SYSTÉMU Cr-Ga-N

J. LEITNER<sup>1</sup>, D. SEDMIDUBSKÝ<sup>2</sup>, P. SVOBODA<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze

<sup>2</sup>Ústav anorganické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6

<sup>3</sup>Katedra fyziky kondenzovaných látek, MFF, Univerzita Karlova, Ke Karlovu 5, 121 16 Praha 2

Korešpondenčný autor: jindrich.leitner@vscht.cz

Nitrid galia GaN dotovaný Mn, Cr a některými dalšími přechodnými kovy patří do skupiny tzv. zředěných magnetických polovodičů s potenciálním využitím ve spintronice. Vlastnosti těchto materiálů, jako např. Curieova teplota feromagnetického přechodu, závisí na jejich fázovém složení a obsahu kovových příměsí v GaN. Cílem této práce je termodynamický popis ternárního systému Cr-Ga-N a výpočet fázových diagramů, na základě kterých je možné posoudit vliv složení, teploty a tlaku na rovnovážné poměry daného systému. Termodynamická data pro binární podsystemy Ga-N, Cr-N a

Ga-N byla převzata z literatury. Data pro ternární nitridy  $\text{Cr}_2\text{GaN}$  a  $\text{Cr}_3\text{GaN}$  byla získána v této práci - hodnoty  $S_m(298\text{ K})$  byly vyhodnoceny z nízkoteplotních měření tepelných kapacit námi připravených polykrystalických vzorků, hodnoty  $\Delta_f H(298\text{ K})$  byly získány na základě *ab-initio* výpočtů a teplotní závislosti molárních tepelných kapacit nad teplotou 298 K byly odhadnuty na základě Neumannova-Koppova pravidla. Vypočtené fázové diagramy při různých teplotách a tlacích  $\text{N}_2$  byly porovnány s dostupnými údaji experimentálními.

Tato práce vznikla za finanční podpory GAČR v rámci grantu GAČR 104/06/0642 a MŠMT ČR v rámci projektů VZ MSM 6046137302 a VZ MSM 0021620834.

## CHARAKTERIZÁCIA SUPRAMOLEKULOVÝCH VRSTIEV TIOLOVANÝCH CYKLODEXTRÍNOV METÓDOU HMOTNOSTNEJ SPEKTROMETRIE SEKUNDÁRNYCH IÓNOV

L. RÁBARA<sup>1</sup>, M. ARANYOSIOVÁ<sup>2</sup>, D. VELIČ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Bratislava

<sup>2</sup>Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, Bratislava

Korešpondenčný autor: [rabara@fns.uniba.sk](mailto:rabara@fns.uniba.sk)

Supramolekulové štruktúry na báze cyklodextrínov sú študované metódou hmotnostnej spektrometrie sekundárnych iónov (SIMS) [1]. Tieto štruktúry sú pripravené na substrátoch pokrytých zlatým filmom. Ponáraním substrátu do roztoku tiolovaných cyklodextrínov vznikajú podobne ako pri lineárnych alkántioloch samozostavené monomolekulové vrstvy (self-assembled monolayer, SAM). Na tieto cyklodextrínové monovrstvy (CD-SAM) sú nanášané rôzne anorganické alebo organické materiály s cieľom vytvoriť supramolekulovú vrstvu na povrchu [2].

Cyklodextríny sú použité s ohľadom na ich komplexačné vlastnosti, ktoré sú dobre otestované mnohými organickými látkami rozličnej polárnosti. Monomolekulové vrstvy cyklodextrínových tioderivátov sú vytvárané so zámerom inklúzie host'ovských látok v 2D matici hostiteľských molekúl. Rovnomerne usporiadané cyklodextríny ukotvené na zlatom filme sú základným predpokladom pre tvorbu povrchového čipu. Tento môže slúžiť ako chemický senzor [3] alebo pamäťová jednotka.

Vyšetrované sú supramolekulové komplexy cyklodextrínov s inkluzívne viazaným železom nasadeným pomocou Knudsenovej efúznej cely pri nízkom tlaku. V hmotnostných spektrách sú pozorované píky cyklodextrínov, ich fragmentov, klastrov zlata, železa a cyklodextrínov prichytených k atómom substrátu. V spektrách s pozitívnou polaritou sekundárnych iónov je pozorovaná kationizácia hmotnejších molekulových iónov organického pôvodu.

Táto práca vznikla za podpory grantov VEGA 1/3577/06 a APVT-20-029804.

- [1] J. Vickermann, D. Briggs; ToF-SIMS: surface analysis by mass spectrometry, Surface Spectra & IM Publications, Chichester, 2001
- [2] D. Velic, G. Koehler; Chem. Phys. Lett. 371 (2003) 483
- [3] Y. Yang, X. Yang, Y.L. Liu, Z.M. Liu, H.F. Yang, G.L. Shen, R.Q. Yu; J. Photochemistry and Photobiology A: Chemistry 171 (2004) 141

## AMPEROMETRICKÁ DETEKCE SUBMIKROMOLÁRNÍCH KONCENTRACÍ GENOTOXICKÝCH A EKOTOXICKÝCH LÁTEK POMOCÍ NETRADIČNÍCH PRACOVNÍCH ELEKTROD

J. BAREK, K. PECKOVÁ, A. DAŇHEL, J. MUSILOVÁ, J. ZIMA

Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Albertov 6, CZ 12843 Praha 2

Korešpondenčný autor: [barek@natur.cuni.cz](mailto:barek@natur.cuni.cz)

Přechod od voltmetrických vsádkových analýz k průtokovým amperometrickým stanovením je motivován snahou o zvýšení selektivity (kombinace vysokoúčinné kapalinové chromatografie s elektrochemickou detekcí - HPLC-ED) či snahou o zkrácení doby stanovení (průtoková injekční analýza s elektrochemickou detekcí - FIA-ED). Pro úspěšné HPLC-ED či FIA-ED stanovení má rozhodující význam použitá pracovní elektroda a materiál z něhož je vyrobena, který rozhoduje o použitelném potenciálovém oknu, zbytkovém proudu a šumu, stálosti měřeného signálu a jeho případném poklesu v důsledku pasivace této elektrody. V tomto příspěvku bude věnována pozornost využití netradičních elektrodových materiálů, které nabízí některé výhody ve srovnání s klasickými elektrodovými materiály. Jako příklad lze uvést tuhé amalgamové elektrody s potenciálovým oknem srovnatelným s elektrodami rtuťovými avšak mechanicky stabilnějšími a tudíž snadno kompatibilními s měřením v průtokových systémech [1]. Snadná elektrochemická předprava těchto elektrod pak minimalizuje problémy s jejich pasivací v průtokovém uspořádání. Uhlíkové pastové elektrody na bázi mikrokuliček ze skelného uhlíku mají snadno obnovitelný povrch poskytující stabilní signál jak pro oxidovatelné tak i pro redukovatelné genotoxické látky [2]. Borem dopované diamantové filmové elektrody pak představují zřejmě nejperspektivnější elektrodový materiál pro stanovení elektrochemicky oxidovatelných i redukovatelných látek [3]. Tato tvrzení budou dokumentována na příkladech stanovení submikromolárních koncentrací vybraných genotoxických sloučenin ze skupiny protinádorových léčiv, nitrovaných

polycyklických a heterocyklických uhlovodíků a jejich amino a hydroxy analog a některých ekotoxických pesticidů,

*Tento výzkum byl podporován MŠMT ČR ( LC 06035 a MSM 0021620857) a Grantovou agenturou České republiky (203/07/P261)*

- [1] Yosypchuk B., Novotný L.: Crit. Rev. Anal. Chem. 2002, 32, 141.
- [2] Švancara I., Vyřas K., Berek J., Zima J.: Crit. Rev. Anal. Chem. 2001, 31, 311.
- [3] Berek J., Fischer J., Navrátil T., Pecková K., Yosypchuk B., Zima J.: Electroanalysis, v tisku.

### IONTOVÉ KAPALINY - MODERNÍ TRENDY V ANALYTICKÉ CHEMII

M. ZAPADLO<sup>1</sup>, E. BENICKÁ<sup>2</sup>, K. VÍTKOVÁ<sup>1</sup>, J. MYDLOVÁ<sup>2</sup>, L. ČÁP<sup>1</sup>, P. BARTÁK<sup>1</sup>, J. KRUPČÍK<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Tř. Svobody 8, 771 46 Olomouc

<sup>2</sup>Ústav analytickej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej chémie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava

Korešpondenčný autor: mikzap@seznam.cz

Otázka volby stacionární fáze v plynové chromatografii, zejména ve spojení s hmotnostní spektrometrií, je v dnešní době často diskutované téma. Nejnovější trendy vývoje směřují k použití iontových kapalin jako stacionárních kapalin (fází) pro kapilární kolony. Kromě plynové chromatografie se iontové kapaliny používají v kapilární elektroforéze a voltmetrických metodách, jako matrice pro MALDI-MS a jako stacionární fáze pro SPME. Dále se využívají jako náhrada za klasická rozpouštědla při extrakcích kapalina-kapalina, progresivní reakční systémy nebo katalyzátory v organických syntézách a dokonce i jako součást prostředí při biokatalytických transformacích. Pro jejich nehořlavost se předpokládá široké uplatnění v oblasti lithiových bateriových článků. Iontové kapaliny jsou organické soli skládající se z organického kationtu a organického či anorganického aniontu s teplotou tání pod 100 °C. Výzkum a vývoj v oblasti iontových kapalin vedl k objevu nových iontových kapalin s teplotou tání nižší než 25 °C. Iontové kapaliny na bázi N-alkylimidazolu byly použity pro separace hydroformylačních produktů alkenů, modelových směsí fenolů, halogenfenolů a analogů a obecně používaných testovacích směsí (Grobova směs). Na základě retenčních dat byly popsány retenční charakteristiky analyzovaných modelových směsí a porovnány s komerčně dostupnými kolonami s polární i nepolární stacionární fází.

*Autoři této práce děkují za finanční podporu MŠMT ČR (grant MSM*

*6198959216) a Slovenskej agenture na podporu vyskumu a vyvoja (APVV 20-035-205).*

- [1] Anderson J.L., Armstrong D.W.: Anal. Chem. 77, 6453 (2005).
- [2] Armstrong D.W., He L., Liu L.-S.: Anal. Chem. 71, 3873 (1999).
- [3] Nara S.J., Harjani J.R., Saunkhe M.M.: Tetrahedron Lett. 43, 2979 (2002).

### VYUŽITÍ NOVÝCH KOMPOZITNÍCH PEVNÝCH AMALGÁMOVÝCH ELEKTROD V ANORGANICKÉ I ORGANICKÉ ELEKTROANALÝZE

T. NAVRÁTIL<sup>1</sup>, B. YOSYPCHUK<sup>1</sup>, A. LUKINA<sup>2</sup>, K. PECKOVÁ<sup>3</sup>, J. BAREK<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., Dolejškova 3, 182 23 Praha 8

<sup>2</sup>Katedra analytické chemie, Chemicko-technologická fakulta, Tomská polytechnická univerzita, Leninova 30, Tomsk, 34050

<sup>3</sup>Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Albertov 6, CZ 12843 Praha 2

Korešpondenčný autor: navratil@jh-inst.cas.cz

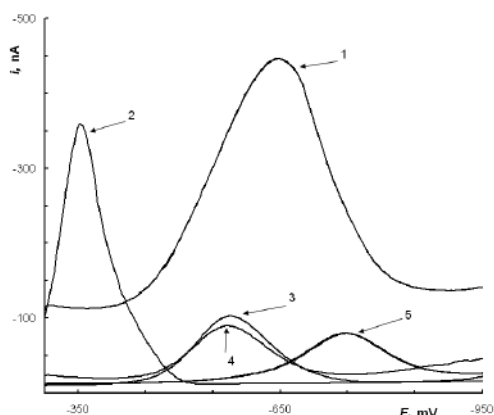
Jako zdařilý kompromis mezi rtuťovými kapalnými a pevnými elektrodami se jeví netoxické, pevné amalgámové elektrody dentálního typu<sup>1,2</sup> zaváděné skupinou z Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského. Mezi jejich výhody patří široké potenciálové okno v katodické oblasti, nenáročná předúprava, netoxicity elektrodového materiálu, dlouhodobá stabilita odezvy či snadná manipulace při využití v terénních měření. Podle stavu povrchu lze MeSAE rozdělit na následující typy: **leštěná** - pevná amalgámová elektroda neobsahující kapalnou rtuť (p-MeSAE); **filmová** - leštěná MeSAE pokrytá rtuťovým filmem (MF-MeSAE); **menisková** - leštěná MeSAE pokrytá rtuťovým meniskem (m-MeSAE); **pastová** - pracovní elektroda na bázi jemného prášku pevného amalgámu a kapalného oleje (MeSA-PE). Znalosti autorů z oblasti kompozitních elektrod (např.<sup>1,3</sup>) byly využity při konstrukci **kompozitních** pevných amalgámových elektrod (MeSA-CE), složených z práškového amalgámu (např.: AgSA: 60 % Hg, 40 % Ag) a z izolátoru. Pro první pokusy byla zkonstruována AgSA-CE sestávající z 80 % (m/m) pevného amalgámu a 20 % epoxidové pryskyřice. V tomto příspěvku jsou prezentovány některé z počátečních výsledků dosažené na těchto kompozitních elektrodách. Povrchová struktura jak leštěná tak filmové AgSA-CE byla zkoumána mikroskopicky i elektrochemicky. S tudium vlastností AgSA-CE bylo prováděno na detailně prozkoumaných látkách, které se často používají pro testování nových elektrod (p-nitrofenol, KIO<sub>3</sub>, Cd(II), Pb(II), Tl(I), kyselina askorbová aj.). Obdrženo



výsledky byly srovnávány s výsledky získanými na jiných typech amalgámových elektrod (p-AgSAE, m-AgSAE, m-CuSAE) i na HMDE. Pracovní potenciálový rozsah AgSA-CE je srovnatelný s m-AgSAE i HMDE. Srovnání píků p-nitrofenolu získaných na různých pracovních elektrodách (Obr. 1) ukazuje, že AgSA-CE má vlastnosti obdobné jako pevná amalgámová elektroda.

Tato práce vznikla s podporou projektu MPO ČR 1H-PK/42, GA ČR č. 203/07/1195, MŠMT ČR (projekt LC 06035 a MSM 0021620857) a grantu Ministerstva vzdělávání a vědy Ruské federace.

- [1] Barek J., Fischer J., Navratil T., Peckova K., Yosypchuk B., Zima J.: *Electroanalysis*, accepted (2007).
- [2] Yosypchuk B., Novotny L.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 32, 141 (2002).
- [3] Navratil T., Kopanica M.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 32, 153 (2002).



Obr.1 Srovnání odezvy redukce p-nitrofenolu na AgSA-CE,  $8,58 \cdot 10^{-7}$  mol/L v 0,1M octanovém pufru o pH 4,8, na: 1 - AgSA-CE, 2 - HMDE, 3 - m-AgSAE, 4 - m-CuSAE, 5 - p-AgSAE; DPV;  $v = 20$  mV/s.

### STANOVENÍ TEPELNÝCH KAPACIT SMĚSNÝCH OXIDŮ $Sr_2Nb_2O_7$ A $Ca_2Nb_2O_7$

J. LEITNER<sup>1</sup>, D. SEDMIDUBSKÝ<sup>2</sup>, K. RŮŽIČKA<sup>3</sup>, M. STRAKA<sup>3</sup>, P. SVOBODA<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze

<sup>2</sup>Ústav anorganické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6

<sup>3</sup>Ústav fyzikální chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze

<sup>4</sup>Katedra fyziky kondenzovaných látek, MFF, Univerzita Karlova, Ke Karlovu 5, 121 16 Praha 2

Korešpondenční autor: jindrich.leitner@vscht.cz

Směsné oxidy  $AE_2Nb_2O_7$  ( $AE = Ca$  nebo  $Sr$ ) vykazují řadu pozoruhodných fyzikálních vlastností:  $Sr_2Nb_2O_7$  ( $S_2N$ ) je feroelektrický materiál s  $T_C = 1342$  °C, který je rovněž fotokatalyticky účinný,  $Ca_2Nb_2O_7$  ( $C_2N$ ) je nelineární optický materiál. Současně se jedná o fáze, které mohou vznikat v průběhu přípravy směsných oxidů  $Sr_2BiNb_2O_9$  a  $Ca_2BiNb_2O_9$ , materiálů vhodných pro výrobu bezolovnatých feroelektrických pamětí typu FeRAM. Pro posouzení termodynamické stability  $S_2N$  a  $C_2N$  při zvýšených teplotách jsou nezbytná příslušná termodynamická data, která však dosud nejsou kompletní. Tato práce se zabývá stanovením teplotní závislosti molární tepelné kapacity obou oxidů v oboru teplot 0 - 1500 K. Pro měření  $C_p$  v oblasti 0-300 K byla použita metoda relaxačního času (přístroj PPMS, Quantum Design), pro oblast 260-350 K metoda DSC (Micro DSC III, Setaram) a 700-1500 K metoda drop (MHTC 96, Setaram). Z nízkoteplotních měření byly vyhodnoceny molární entropie  $S_m(298$  K), z měření nad teplotou 298 K teplotní závislosti molárních tepelných kapacit.

Tato práce vznikla za finanční podpory GA ČR v rámci grantu 104/07/1209 a MŠMT ČR v rámci projektů VZ MSM 6046137307 a VZ MSM 0021620834

## Prednášky – sekcia 2

### VÝZKUM APLIKACÍ NANO OXIDU TITANIČITÉHO V ČR

A. MLČOCH

České technologické centrum pro anorganické pigmenty, a.s. Přešov

Korešpondenční autor: antonin.mlcoch@precheza.cz

Rozbor dosavadních výsledků vývoje přípravy a aplikací nepigmentového oxidu titaničitého pro různé aplikace. Vývoj je realizován ve spolupráci s řadou zahraničních a tuzemských vývojových pracovišť a ve spolupráci s budoucím investorem Precheza a.s. Přešov. Jsou komentovány aplikace jako chemicky aktivní látky k odbourávání chemických bojových látek, jako fotokatalyzátory, UV absorbéry a ve stavebnictví.

### TENKÉ TRANSPARENTNÍ $TiO_2$ FILMY - VZTAH MEZI TLOUŠŤKOU, KRYSTALOGRAFICKOU STRUKTUROU A FOTOINDUKOVANÝMI VLASTNOSTMI

P. NOVOTNÁ<sup>1</sup>, J. KRÝSA<sup>1</sup>, J. MAIXNER<sup>1</sup>, M. KLEMENTOVÁ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vysoká škola chemicko-technologická Praha

<sup>2</sup>Ústav anorganické chemie AV ČR

Korešpondenčný autor: [petruska.novotna@vscht.cz](mailto:petruska.novotna@vscht.cz)

Oxid titaničitý má široké uplatnění. Většina komerčně připravovaného TiO<sub>2</sub> slouží jako vysoce účinný bílý pigment. Dále se využívá k výrobě titaničitých smaltů, jako složka do speciálních skel a glazur, jako nukleátor ve sklokeramice, při konstrukci senzorů, přípravě katalyzátorů, solárních článků atd. Jeho významnou vlastností je fotoaktivita. TiO<sub>2</sub> je znám svým polymorfismem. V přírodě se vyskytuje především ve třech krystalografických modifikacích: tetragonální anatas (3,84 g/cm<sup>3</sup>) a rutil (4,235 g/cm<sup>3</sup>) a romboický brookit (4,065 g/cm<sup>3</sup>).

Předkládaná práce se zabývala vlivem tloušťky TiO<sub>2</sub> vrstev na jejich krystalinitu a fotoindukované vlastnosti, zejména fotoaktivitu. K přípravě vrstev byla použita metoda sol-gel. Jako titaničitý prekurzor na přípravu vrstev byl použit tetraisoproxytitanát. Isopropylalkohol a acetylaceton plnily funkci rozpouštědel. Jako katalyzátor hydrolyticko-kondenzačních reakcí byla použita kyselina chlorovodíková. Nanosené vrstvy byly vždy vypáleny při T=500 °C po dobu 120 min.

Připravené vrstvy byly homogenní, hladké - drsnost se pohybovala v rozmezí 2 až 4 nm. Jejich tloušťka se zvyšovala s počtem potažení, 80±10 nm (1 vrstva), 340±10 nm (4 vrstvy). Absorbce UV záření o λ=365 nm vrstvami se zvyšovala s počtem vrstev. Na zjištění fotoaktivity připravených vrstev byly použity dvě modelová barviva - aniontové Oranž II a kationtové methylenová modř. Rychlost odbourávání byla vyšší v případě kationtového barviva, což pravděpodobně souvisí s jejich rozdílnou adsorbci. Povrch vrstev byl značně hydrofilní, hodnota kontaktního úhlu byla mezi 7° - 9° a nezávisela na tloušťce vrstev.

RTG analýzou nebyla u filmu tvořeného jednou nebo dvěma vrstvami detekována přítomnost žádné krystalografické formy TiO<sub>2</sub>. V případě tlustších filmů (3 a 4 vrstvy) byla zjištěna přítomnost brookitu. Absence krystalické fáze TiO<sub>2</sub> v případě tenkých filmů (1, 2 vrstvy) vyplývající z RTG analýzy může být způsobena velmi malým obsahem krystalické fáze a nedostatečnou tloušťkou vrstev (mez detekce přístroje), neboť následnou analýzou povrchu s využitím SEM byly ve vrstvách pozorovány zárodky krystalů

*Autoři děkují za finanční podporu Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (projekt IM0577).*

#### COMPARATIVE STUDY OF SELF-CLEANING EFFICACY OF DIFFERENT TiO<sub>2</sub> THIN FILMS

J. DRBOHLAVOVÁ<sup>1</sup>, M. VESELÝ<sup>1</sup>, C. GUILLARD<sup>2</sup>, E. PUZENAT<sup>2</sup>

<sup>1</sup>VUT v Brně, Fakulta chemická, Ústav fyzikální a spotřební chemie

<sup>2</sup>Institut de recherches sur le catalyse et l'environnement de Lyon UMR 5256 CNRS-Université Lyon 1

Korešpondenčný autor: [jana.drbohlavova@email.cz](mailto:jana.drbohlavova@email.cz)

Titanium dioxide transparent layers were deposited on pyrex glass plates using sol-gel method. Properties of layers prepared in the conventional way from organometallic precursor (titanium isopropoxide) were compared with new completely inorganic precursor: "Ti<sub>8</sub>O<sub>12</sub>" (titanium aqua-oxochloride). [1] This precursor is easy to handle, soluble in polar solvent and polycondensation in solution is under control. The concentration of titanium in all precursors was 0.35 M.

This work deals with the study of the correlation between photocatalytic activity and physico-chemical properties of prepared films. The self-cleaning effect of TiO<sub>2</sub> layers was evaluated by photocatalytic oxidation of stearic acid (SA) in deposited phase. Detection of SA film thickness decrease was observed by FTIR spectroscopy from integrated absorbance in the region of 2700-3000 cm<sup>-1</sup>. It was found that increasing number of TiO<sub>2</sub> layers enhances the photocatalytic activity for both types of precursors.

Optical properties of films, including refractive index and thickness were measured using UV-VIS spectroscopy and ellipsometry. The thickness was estimated to 30 nm for 1 TiO<sub>2</sub> layer in the case of Ti<sub>8</sub>O<sub>12</sub> precursor and 40-50 nm for TiO<sub>2</sub> from organometallic precursor. The films porosity was calculated using Lorentz-Lorenz equation. [2] The film composition was observed by Raman spectroscopy which revealed the anatase phase to be dominant with small portion of less photoactive rutile. ATR-FTIR spectroscopy was used to identify the organic residues in TiO<sub>2</sub> layer: the presence of carbonate was found even though the films were calcinated at 450 °C.

[1] Brohan L, Sutrisno H., Piffard Y., Puzenat E., Rouet A., Terrisse H.: Titanium aqua-oxochloride and preparation method of thereof, patent CNRS PCT WO 2004/101436 A2 (25/11/2004)

[2] Born M., Wolf E.: Principle of Optics, Pergamon, New York 1975, p. 85

#### VLIV SUBSTRÁTU NA VÝSLEDNÉ FOTOINDUKOVANÉ VLASTNOSTI TENKÝCH TiO<sub>2</sub> FILMŮ

J. ZITA<sup>1</sup>, J. KRÝSA<sup>2</sup>, V. ZANCHETTA<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav anorganické technologie

<sup>2</sup>Vysoká škola chemicko-technologická Praha

<sup>3</sup>University of Cagliari

Korešpondenčný autor: [jiri.zita@vscht.cz](mailto:jiri.zita@vscht.cz)

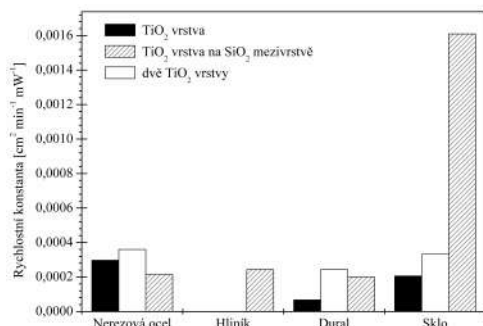
TiO<sub>2</sub> fotokatalyzátory se většinou připravují v tenké vrstvě metodou sol-gel na skleněný substrát. V součas-

nosti se již aplikace fotokatalýzy rozšiřují i do oblastí, kde je nutno použít jiné typy substrátů (kovové konstrukce, keramika, smalt).

Cílem této práce bylo proto studium fotoindukovaných vlastností  $\text{TiO}_2$  vrstev na několika typech substrátů (nerez ocel, hliník a dural) a jejich srovnání s vrstvami připravenými na skleněném podkladu.

Struktura a fyzikální složení vrstev bylo sledováno pomocí SEM a XRD,  $\text{TiO}_2$  a  $\text{SiO}_2$  sol byl charakterizován pomocí TG a DTA s MS. Fotokatalytická aktivita byla zjišťována pomocí degradace Acid Oranže 7, kde koncentrace AO7 byla měřena UV-VIS spektroskopii. Smáčivost (hydrofilita) byla zjišťována pomocí měření kontaktního úhlu. První výsledky ukazují, že při použití skleněného substrátu zvyšuje přítomnost  $\text{SiO}_2$  mezivrstvy při fotokatalytickém rozkladu AO7 výslednou aktivitu až  $4\times$ . V tomto případě je  $\text{SiO}_2$  velmi účinnou bariérou proti difuzi  $\text{Na}^+$  iontů ze skleněného substrátu. V případě použití kovových substrátů, kde se přítomnost  $\text{Na}^+$  iontů nepředpokládá,  $\text{SiO}_2$  mezivrstva již takový vliv nemá (Obr. 1). Ukazuje se však, že vlastnosti, které má daná  $\text{TiO}_2$  vrstva na skleněném substrátu, nelze snadno reprodukovat na jiných substrátech.

Autoři děkují za finanční podporu Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (projekt 1M0577)



1 Vliv substrátu a  $\text{SiO}_2$  mezivrstvy na výslednou rychlostní konstantu fotokatalytické degradace AO7

## FOTOKATALYTICKÉ PROCESY NA TRANSPARENTNÍCH VRSTVÁCH OXIDU TITANIČITÉHO

M. VESELÝ<sup>1</sup>, P. DZIK<sup>1</sup>, M. VESELÁ<sup>2</sup>, J. CHOMOUCKÁ<sup>1</sup>, J. DRBOHLAVOVÁ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>VUT v Brně, Fakulta chemická, Ústav fyzikální a spotřební chemie

<sup>2</sup>VUT v Brně, Fakulta chemická

Korešpondenční autor: vesely-m@fch.vutbr.cz

Využití světlem indukovaných redoxních procesů na povrchu fotokatalyzátorů se ukazuje stále víc slibnějším

a nachází další možnosti praktické aplikace. Po absorpci záření s energií větší než je šířka zakázaného pásu příslušného polovodiče dochází ke generaci páru elektron-díra. Za příznivých podmínek dochází po migraci nosičů náboje k povrchu částice k jejich interakci s adsorbovanými molekulami, jakými jsou voda, kyslík, hydroxylové ionty a vznikají vysoce reaktivní kyslíkaté radikály, zejména hydroxylový radikál, atakující organické molekuly. Tento efekt způsobuje také sluneční záření, a tím se otevřely možnosti průmyslového využití pro výrobu samočisticích materiálů. Byly připraveny transparentní a fotokatalyticky aktivní vrstvy oxidu titaničitého sol-gel procesem třemi technikami nanášení solu. Tradiční metody, jako jsou odstředivé nanášení a nanášení vrstev vytahováním z roztoku byly doplněny o novou metodu nanášení solu inkjetovou technikou. Vrstvy byly charakterizované nejen fyzikálně-chemickými postupy, ale také fotokatalytickými reakcemi na modelových látkách simulujících degradaci polutantů ve vodách, degradaci organických látek na suchých površích a samodeseinfekční schopnost. Samodeseinfekční schopnost byla studovaná na kvasinkách, přičemž živé a mrtvé buňky byly rozlišeny fluorescenční mikroskopií. Byla studována kinetika těchto procesů.

Tato práce vznikla za podpory projektu MSM0021630501

[1] Rincón A.-G., Pulgarin C.: Applied Catalysis B: Environmental 49, 99 (2004)

[2] Kühn K. P.: Chemosphere 53, 71 (2003)

## APLIKACE POTENCIÁLU PŘI FOTOKATALYTICKÉM ODBOURÁVÁNÍ NA $\text{TiO}_2$

J. KRÝSA<sup>1</sup>, G. WALDNER<sup>2</sup>, J. ZITA<sup>3</sup>, P. NOVOTNÁ<sup>1</sup>, M. ZLÁMAL<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Vysoká škola chemicko-technologická Praha

<sup>2</sup>ARC, Funkční materiály, A-2444 Seibersdorf

<sup>3</sup>Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav anorganické technologie

Korešpondenční autor: josef.krýsa@vscht.cz

Od počátků aplikace fotokatalýzy pro čištění životního prostředí je oxid titaničitý intenzivně studován a to především ve vodné suspensi [1]. Použití fotokatalyzátoru v suspensi má výhodu ve výborném přestupu hmoty avšak nevýhodou je nutnost jeho odstranění například filtrační a dále vysoký stupeň rekombinace fotogenerovaných děr a elektronů. Tyto nedostatky mohou být eliminovány nanášením katalyzátoru na vodivý podklad a aplikací vnějšího potenciálu [2].

Cílem této práce je příprava a charakterizace vrstev za účelem možné aplikace vnějšího potenciálu.  $\text{TiO}_2$

vrstvy byly připraveny různými způsoby a charakterizovány RTG, SEM, UV-VIS spektroskopii a měřením fotoproudů. Hodnoty fotoproudu společně s potenciálem otevřeného obvodu jsou měřítkem redoxních reakcí, které probíhají na povrchu katalyzátoru, t. j. oxidace vody a jiných oxidovatelných látek a redukce rozpuštěného kyslíku (nebo vody na vodík). Proto byly měřeny polarizační křivky s důrazem na vliv tloušťky filmu a koncentrace oxidovatelné látky.

V práci jsou dále diskutovány a experimentálně ověřeny následující klíčové body.

1. Film musí mít dostatečnou tloušťku za účelem optimální absorpce dopadajícího světla. Penetrační hloubka světla je závislá na vlnové délce. Na druhé straně nárůst tloušťky nad určitou mez již není efektivní z důvodů vyšší rekombinace.
2. Optimální potenciál pro zvýšení rychlosti fotokatalýzy. Ten může být získán z polarizačních křivek (E-i) jako potenciál v oblasti proudového plata (t.j. proud nezávisí na aplikovaném potenciálu).
3. Požadavek dostatečné vodivosti (iontová vodivost čištěného roztoku) může být splněn použitím minimální mezielektrodové vzdálenosti.
4. Přítomnost oxidovatelné látky může silně ovlivnit fotoelektrochemickou odezvu vrstev [3]. Toto je zvláště významné v případě porézních vrstev a silně se adsorbujících látek.

Autoři děkují za finanční podporu Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (projekt IM0577).

- [1] 1. B. Kraeutler, A.J. Bard, J. Amer. Chem. Soc., 1978, 100 (19), 5985-92.
- [2] 2. K. Rajeswahr, J. Appl. Electrochem, 1995, 25, 1067.
- [3] 3. G. Waldner, R. Gómez, M. Neumann-Spallart, Electrochim. Acta, 2007, 52, 2634-9.

## Prednášky – sekcia 3

### THE MOLECULE IN FRONT OF THE MIRROR

J. MIKUŁA

Center of Molecular and Macromolecular Studies, Polish Academy of Sciences, Sienkiewicza 112, 90-363 Lodz

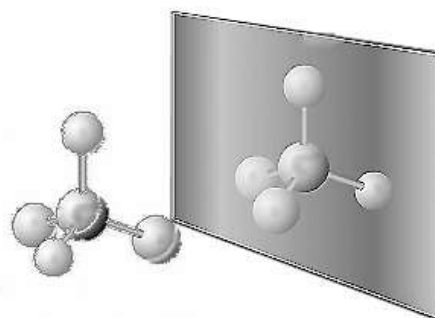
Korešpondenčný autor: psyikoty@poczta.fm

A chiral structure is one for which the mirror-image form cannot be superimposed on the original by rotation or translation; the two forms are enantiomers. Chirality is

pervasive in Nature at several levels. There are many examples in terms of body structures; one is that the human left hand cannot be superimposed on the mirrorimage right hand. Similarly, there are behavioral asymmetries such as left- and right-handedness. Furthermore, macromolecules tend to be homochiral, that is, made up from units of the same chirality. Thus proteins, nucleic acids and other biomolecules owe their activity to their asymmetry. Biosynthesis of the natural compounds that reveal optical activity, thanks to the enzymatic catalysis is 100% enantioselective. However, the chemical synthesis of the compounds with desired chirality is still a challenge for modern science. The ability of absolute configuration and enantiomeric excess determination is important as much as the precision of asymmetric synthesis. Senses detect asymmetry as easily as it is generated by nature. Our sight, smell, taste, and touch have natural ability to distinguish between left- and righthanded objects. Fragrance industry is basing on compounds of precisely defined configuration, and nose seems to be very efficient stereochemist. Pairs of enantiomers usually have different odor. The scent recognition will be discussed as an reaction of a chiral ligand with proper receptor. Other, instrumental methods of investigation of chiral objects, including NMR spectroscopy will be presented.

[1] R. Bentley, Chem. Rev, 106, 4099-4111 2006

[2] M. J. Potrzebowski, A. Jeziorna, S. Kazmierski, New J. Chem, 2007



### MOLECULAR DYNAMICS OF STAR-SHAPED POLY(EPSILON-CAPROLACTONE)S IN TETRAHYDROFURAN SOLUTION FOLLOWED BY FLUORESCENCE SPECTROSCOPY

J. LIBISZOWSKI<sup>1</sup>, M. DANKO<sup>2</sup>, M. WOLSZCZAK<sup>3</sup>, D. RAČKO<sup>2</sup>, A. DUDA<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Center of Molecular and Macromolecular Studies, Polish Academy of Sciences, Sienkiewicza 112, 90-363 Lodz

<sup>2</sup>Ústav polymérov, Slovenská Akadémia Vied, Dúbravská cesta, SK-84236 Bratislava, Slovenská republika

<sup>3</sup>Institute of Applied Radiation Chemistry, Technical University, Wroblewskiego 15, 93-590 Lodz

Korešpondenčný autor: upoldan@savba.sk

In the present work we are focusing on molecular dynamics of pyrene functionalized, one-, two-, four-, and six-arms poly(epsilon-caprolactone)s (PCL's) ( $M_n = 3000$  g·mol<sup>-1</sup> per arm) studied in THF solution, using static and dynamic fluorescence measurements. In addition, theoretical molecular calculations of six-arms stars with 20 monomer units per arm are performed for visualization of the corresponding structures and better understanding of the observed phenomena. Previously reported results for the star-shaped poly(L-lactide)'s, [1] will also be compared.

The dilute solutions ( $10^{-8}$  -  $10^{-6}$  mol·dm<sup>-3</sup> for pyrene) of these polymers exhibit excimer emission exclusively due to the intramolecular cyclization of the pyrene-functionalized chain-ends. Excimer intensities of two- and four-arms PCL's are comparable with excimer intensities observed for similar PLA's. Six-arms PCL show less intensive excimer emission, comparing to its PLA counterpart, while flexibility of the PCL chain is higher.

Time-resolved fluorescence measurements show complex decay profiles of monomer and excimer quenching. Excimer decay profiles of star-shaped telechelic polymers consist of components related also to dynamic formation of excimers. Two-arms, linear poly(epsilon-caprolactone) of  $M_n = 7000$  g·mol<sup>-1</sup> shows also partial formation of static pyrene excimers. Molecular dynamic calculations, employing polymer consistent force-field potential energy function [2], carried out for six-arms PCL and PLA stars show why molecular dynamics of PCL chains is different from that of PLA polymers with the similar architecture. Poly(epsilon-caprolactone) star adopts random coil conformation (Figure 1), whereas poly(L-lactide) star rather forms paired polymer chains. This is why excimer formation probability is higher for the poly(L-lactide) star.

*The authors thank for support of the Polish Ministry of Scientific Research and Information Technology - grant no. PBZ-KBN-070/T09/2001/2 for the period: 2003-2006, VEGA grant agency of Slovak Republic through grant no. 2/6015/6 and APVV grant agency for the financial support of this work through project No. 51-004904.*

[1] M. Danko, T. Biela, J. Libiszowski, M. Wolszczak, A. Duda, J. Polym. Sci. A: Polym. Chem. 2005, 43, 4586-4599.

[2] J. R. Maple, U. Dinur, A. T. Hagler, Proc. Natl. Acad. Sci. 1988, 88, 5350.

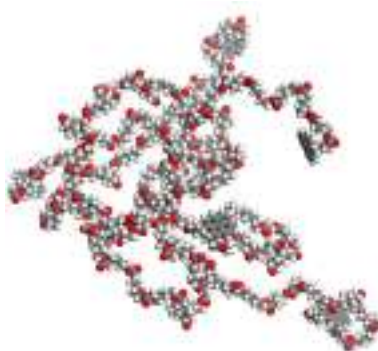


Figure 1: Calculated molecular structure of six-arms poly(epsilon-caprolactone) grown from the dipentaerythritol core and fitted with pyrene probe on chain-ends.

## SYNTÉZA A OVĚŘENÍ ÚČINKU POLYMERNÍHO FENOLICKÉHO ANTIOXIDANTU V POLYURETHANOVÝCH SYSTÉMECH

L. PROKŮPEK<sup>1</sup>, J. HEPNEROVÁ<sup>1</sup>, V. ŠPAČEK<sup>2</sup>, J. KOVÁŘOVÁ<sup>3</sup>, J. PODEŠVA<sup>3</sup>, M. VEČEŘA<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Ústav polymerních materiálů

<sup>2</sup>Synpo, a.s. Pardubice

<sup>3</sup>Ústav makromolekulární chemie, Akademie věd České republiky, Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6

Korešpondenčný autor: lubos.prokupek@upce.cz

Cílem této práce je studium vlastností polymerního stabilizátoru připraveného z nízkomolekulárního fenolického stabilizátoru, který je pomocí distančního bočního řetězce („spaceru“) připojen na polybutadienový řetězec. Jako polybutadienová část jsou v této práci používány tzv. kapalné butadienové kaučuky ( $M_n$  cca 2000 - 3000), jež jsou svými vlastnostmi na rozhraní poly- a oligomerních látek, proto vzniklý antidegradant je poly/oligomerní.

Lze předpokládat, že s délkou a ohebností spaceru poroste i stupeň volnosti a tím se zvýší účinnost antioxidační struktury. Z důvodu, že je antioxidační struktura součástí skeletu makromolekuly, je teoreticky zamezeno jakémukoliv vymývání a vypocování stabilizátoru z materiálu.

V této práci byl syntetizován polymerní fenolický antioxidant pomocí třífázové syntézy[1]. Stabilizátor byl v každém kroku charakterizován. Jeho účinnost byla testována na šesti modelových polyurethanových systémech. Polyurethanové systémy byly připraveny z výchozích surovin syntézy a z vyrobeného polymerního fenolického antioxidantu. V systémech byly použity dva typy katalyzátorů (DBTL a ZrAcAc). U připravených vzorků byla sledována účinnost stabilizátoru pomocí reakční kinetiky, gelové permeační chromatografie, termogravimetrie a diferenciální skenovací kalorimetrie.

Tento výzkum byl finančně podporován Grantovou agenturou České republiky (projekt 203/07/0987).

- [1] Podešva J., Kovářová J.: Synthesis and performance of phenolic polybutadiene-bound stabilizers, GA ČR, A4072902.

## VLIV ADITIV ESTERŮ K. METHAKRYLOVÉ NA VLASTNOSTI EP

L. SVOBODA, L. PROKŮPEK, J. ŠAFRÁNEK, J. MACHOTOVÁ, J. ŠŇUPÁREK

Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Ústav polymerních materiálů

Korešpondenční autor: [svoboda@upce.cz](mailto:svoboda@upce.cz)

V posledních letech narůstají nároky na kvalitu a vlastnosti polymerních materiálů. Jednou z cest jak docílit zlepšení vlastností polymerních systémů je jejich modifikace různými aditivami a tvorbou kompozitních materiálů. U epoxidových pryskyřic (EP) se hodně využívají jak anorganické tak organické nanočástice.

Tato práce se zabývá přípravou a studiem esterů kyseliny methakrylové jako polymerních aditiv pro EP a studiem mechanických vlastností modifikovaných epoxidových matic. Připravené akryláty byly homogenizovány s EP jak ve formě vodné disperze tak i vysušených nanočástic. Podle typu EP byly připraveny vzorky ve formě filmů nebo tělísek. Po vytvrzení epoxidových systémů byly měřeny mechanické vlastnosti jako pevnost v tahu a ohybu, DMA, TMA, tvrdost a odolnost proti úderu. Dále byla sledována struktura a morfologie připravených kompozitních materiálů pomocí SEM a dalších metod.

Bylo zjištěno, že mechanické vlastnosti epoxidových pryskyřic závisí na složení a koncentraci polymerních nanočástic zabudovaných v epoxidové matici. Výrazný vliv hraje i funkčnost polymerních aditiv. Bylo zjištěno, že vysušené nanočástice by mohly být využity pro modifikaci licích pryskyřic. Pro lakařské pryskyřice je jejich využití omezené z důvodu špatných filmotvorných vlastností zkoušených systémů.

Autoři děkují ministerstvu školství a tělovýchovy ČR za podporu a financování v rámci projektu MSM 0021627501 a konsorciu EU NoE NanoFunPoly.

## HYBRID SILICAHYDROGELS AS APPROPRIATE MATRICES FOR DIRECT ENCAPSULATION OF VARIOUS BIOLOGICAL SPECIES

I. KRUPA<sup>1</sup>, T. NEDELCEV<sup>1</sup>, J. JAŇOVKOVÁ<sup>1</sup>, I. LACÍK<sup>2</sup>, D. CHORVÁT<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústav polymérov, Slovenská Akadémia Vied, Dúbravská cesta, SK-84236 Bratislava, Slovenská republika

<sup>2</sup>Polymer Institute of SAS, Dúbravská cesta 9, 84236 Bratislava

Korešpondenční autor: [upoljaja@savba.sk](mailto:upoljaja@savba.sk)

Hybrid silicagels produced via sol-gel process are versatile in their composition, processing, optical and mechanical properties. The mild characteristics by the sol-gel process allow to introduce biomolecules inside an silica network. Immobilization of proteins, enzymes and cells within silica based matrices has been the area of interest with the outcome in many applications spanning from biosensors, bioselective chromatography, controlled release of drugs etc. [2]. The preparation, structure and some physical characteristics of various types of hybrid silicagel matrices based on the organofunctional silanes is reported in this work. Tetraethoxysilane, 3-aminopropyltriethoxysilane and 3-epoxypropyltrimethoxysilane were used as building blocks, whereas glycerol and various polymeric additives were used as processing agents. The preparation of transparent material with controlled porosity stable over the long period of use was one of the main aims of this work. The porosity of matrices and their diffusion properties were checked by confocal laser scanning microscopy using fluorescently labeled dextrans with variable molar mass. These results were correlated with leaching of bovine serum albumin used as the model protein encapsulated inside the prepared matrices. The protocol for preparation of the silicagel matrices was developed where both monoliths and thin films were routinely made at pH  $\geq 6,2$ .

The research was supported by the Scientific Grant Agency of the Ministry of Education of Slovak Republic and the Slovak Academy of Sciences (project No. 2/6114/26) and, in part, by Sixth Framework Program of the EU, IP-031867, P. Cezanne.

- [1] Collings, A.F. and Caruso, F. (1997) Biosensors: recent advances. Rep. Prog. Phys. 60, 1497-1445

## Prednášky – sekcia 4

### MUŽ A ŽENA : VEDECKO - HISTORICKÍ ANTAGONISTI

M. MELNÍK

STU, FCHPT Oddelenie anorganickej chémie

Korešpondenční autor: [milan.melnik@stuba.sk](mailto:milan.melnik@stuba.sk)

Univerzálna odlišnosť muža a ženy je determinovaná rozdielnosťou neurofyziologickej anatómie a endokrino-logickej produkcie. Anatomická - iná stavba mozgu a

jeho naprogramovanie, v súčinnosti s rozdielnou produkciou hormónov. Tieto skutočnosti nezostávajú len na vizuálnych odlišnostiach, ale aj na rozličnom vnímaní okolitého sveta a to tak v prijímaní informácií, ako aj ich vyhodnocovaní. Kým vizuálna odlišnosť pohlaví je všeobecne známa, avizujúca je vnímaná len okrajovo. Táto skutočnosť je príčinou celého radu nedorozumení medzi „antagonistickými subjektmi“. Poznávanie vzájomných avizujúcich odlišností, je cestou k skvalitneniu života, harmonizácie, kultúrnosti a vzdelanosti. Pomenovanie, analýza a rozbor avizujúcich odlišností budú predmetom prednášky.

## HISTÓRIA CHEMICKEJ ANALÝZY PRÍRODNÝCH MINERÁLNYCH A LIEČIVÝCH VÔD NA SLOVENSKU

J. ZÁLEŠÁKOVÁ<sup>1</sup>, J. ČÁRSKY<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Zväz slovenských liečebných kúpeľov

<sup>2</sup>Univerzita Komenského, Bratislava, Lekárska fakulta, Ústav lekárskej chémie, biochémie a klinickej biochémie

Korešpondenčný autor: [janka.zalesakova@mail.t-com.sk](mailto:janka.zalesakova@mail.t-com.sk)

Ľudia využívali prírodné vody na liečenie od nepamäti. Ich vlastnosti chuť, zápach, teplotu skúmali zmyslami a pri liečení chorôb sa riadili len skúsenosťami. V období alchymie a najmä iatrochémie sa záujem sústredil aj na chemické skúmanie prírodných vôd, za účelom ich využitia v medicíne. Boli to najmä Paracelsus, Andernacus, Agricola-Bauer z Jáchymova a Elpidianus. Keď sa chémia začala vyučovať na univerzitách zvýšil sa záujem o chemické skúmanie a vlastnosti prírodných liečivých vôd. O chémiu sa zaujímali predovšetkým lekári, ktorí vypracovali i odporúčania kedy, koľko a aké vody používať pri rôznych chorobách (A. Hermann, J. Torkos, J. Lischovíny - žiaci profesora Hoffmana na Lekárskej fakulte v Halle). Veľmi významné bolo dielo Juraja Wernhera (vydané 1549 v Bazileji) “Zázračné vody Uhorska”, v ktorom autor nielen spísal všetky využívané liečivé vody, ale vysvetlil ich vznik v prírode a možnosti vylúhovania minerálov. Panovníčka Mária Terézia svojím nariadením (1763) na vedecké preskúmanie liečivých vôd na území celého mocnárstva podnietila profesora chémie a botaniky na Lekárskej fakulte Trnavskej univerzity J. Winterla k vypracovaniu nových analytických metód pre liečivé vody. V 19. a 20. storočí nastal prudký rozvoj a budovanie kúpeľov. Chemické analýzy vôd sa stali bežnou záležitosťou. V roku 1911 v Nauheime (Nemecko) boli poprvýkrát publikované štandardy a kritéria pre liečivé vody, vrátane rozsahu chemických analýz. Tieto kritéria sa uplatňovali i na analýzy slovenských liečivých vôd. V krajinách s rozvinutým kúpeľníctvom začali vznikať špecializované analytické laboratória pre minerálne a liečivé vody. Od roku 1952 je táto problematika u nás legislatívne upravená.

- [1] Bokesová-Uherová, M., Fundárek, R.: Počiatky vedeckého záujmu o kúpele a liečivé pramene na Slovensku. In: Z dejín vedy a techniky na Slovensku III, s. 265-296, SAV, Bratislava 1964
- [2] Tibenský J. et al.: priekopníci vedy a techniky na Slovensku, s. 155-175, Obzor, Bratislava 1968
- [3] Zálešáková, J.: Almanach slovenských liečebných kúpeľov a žriediel, Serail 1999, 55s.

## K STÉMU VÝROČIU NARODENIA PROF. ING. SAMA STANKOVIANSKEHO

J. ČÁRSKY<sup>1</sup>, V. MADAJOVÁ<sup>2</sup>, B. BOHMOVÁ<sup>2</sup>, M. UHER<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Komenského, Bratislava, Lekárska fakulta, Ústav lekárskej chémie, biochémie a klinickej biochémie

<sup>2</sup>Univerzita Komenského

<sup>3</sup>Slovenská spoločnosť priemyselnej chémie

Korešpondenčný autor: [jozef.carsky@mail.t-com.sk](mailto:jozef.carsky@mail.t-com.sk)

Význačný slovenský chemik, pedagóg a vedec Prof. Ing. Samo Stankoviansky (1907-1980), už počas štúdia na Fakulte chemicko-technologického inžinierstva ČVUT v Prahe (1925-1930) sa oboznamoval s polarografickou analýzou a nadviazal aj osobné kontakty s jej objaviteľom profesorom J. Heyrovským. Pôsobil takmer 20 rokov na VPŠCh v Banskej Štiavnici (v rokoch 1939-1953 ako riaditeľ). Okrem pedagogickej práce sa venoval aj vedeckému výskumu v oblasti rudnej a hutníckej analýzy. Svoje teoretické vedomosti a praktické skúsenosti z klasických analytických metód spracoval do prvej slovenskej monografie o analytickej chémii “Krátky prehľad analytickej chémie látok minerálnych”, ktorá vyšla v roku 1942 s podporou Spolku chemikov Slovákov. V povojnových rokoch sa zamerl na polarografiu a stal sa priekopníkom tejto analytickej metódy na Slovensku. Jeho zásluhou sa Banská Štiavnica stala strediskom polarografického výskumu a miestom stretávania domácich a zahraničných odborníkov na chemických zjazdoch. Bol jedným zo zakladateľov Spolku chemikov Slovákov a jeho prvým starostom a dlhoročným organizátorom spolkového činnosti. V ďalšom období (1953-1980) bol poverený založiť a vybudovať Katedru analytickej chémie PriF UK v Bratislave. Ťažisko jeho vedeckej práce v tomto období spočívalo popri polarografii i v syntéze nových organických činidiel. Jeho dlhodobým záujmom bola však analýza ionogénnych látok pomocou novej analytickej metódy - kapilárnej izotachoforézy. Profesor Stankoviansky má významný podiel na rozvoji tejto metódy nielen z hľadiska detekčných systémov a konštrukcie prístroja, ale aj na jej využití v praxi. S jeho menom je spojený jej ďalší rozvoj na katedre, ktorá vďaka originálnym výsledkom jeho žiakov patrí k popredným a medzinárodne uznávaným pracoviskám v tejto oblasti.

## HISTÓRIA CHEMICKÉHO PRIEMYSLU NA SLOVENSKU

M. UHER<sup>1</sup>, M. JAMBRICH<sup>2</sup>, M. REVÚS<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Slovenská spoločnosť priemyselnej chémie*

<sup>2</sup>*Trenčianska univerzita, Fakulta priemyselných technológií, Katedra chémie a technológie polymérov a textilu*

Korešpondenčný autor: [michal.uher@chtf.stuba.sk](mailto:michal.uher@chtf.stuba.sk)

V roku 2005 na ZCHS'05 boli opísané zborníky vydané v rokoch 1975 - 1999 v ktorých boli uvedené štúdie o histórii rozvoja chemického priemyslu.

V prednáške budeme prezentovať návrh na vypracovanie štúdie o histórii chemického priemyslu na Slovensku členenej na etapy do 1848, 1918, 1939, 1945 až do roku 1990. Postupne sa bude spracovávať 14 odborov, ako aj organizácií, ktorých činnosť podmieňovala rozvoj chemického priemyslu na Slovensku, ako napr. výskumné inštitúcie, výrobné organizácie a vysoké školy.

## PROFESORI J. GAŠPERÍK, M. MARKO A T. KREMPASKÝ - VÝZNAMNÉ OSOBNOSTI SLOVENSKEJ CHÉMIE

M. UHER

*Slovenská spoločnosť priemyselnej chémie*

Korešpondenčný autor: [michal.uher@chtf.stuba.sk](mailto:michal.uher@chtf.stuba.sk)

Slovenská chémia má vo svojej histórii niekoľko významných osobností. V prednáške bude venovaná pozornosť osobnostiam, ktoré v poslednom období dosiahli významné jubileum - 100 rokov od ich narodenia.

Prvým bude slovenský chemik - organický technolog Prof. RNDr. Juraj Gašperík, ktorý by sa bol 100 rokov dožil vo februári roku 2006. Ďalším, v novembri 1906 narodeným významným chemikom bude Prof. Dr. Ing. Miloš Marko, autor prvej slovenskej vysokoškolskej učebnice "Organická chémia", vydané v roku 1955. Tretím, ktorý by sa 11. septembra t.r. dožil 100 rokov bude zakladateľ časopisu Chemické zvesti a prvý dekan odboru chemicko - technologického inžinierstva SVŠT v rokoch 1942 - 1947

## Prednášky – sekcia 5

## DEKONTAMINÁCIA PÔD MOBILIZÁCIOU KADMIA VYUŽITÍM TECHNIKY KONTINUÁLNEJ FYTOEXTRAKCIE

A. HEGEDUSOVA<sup>1</sup>, J. ŠVIKRUHOVÁ<sup>1</sup>, P. BOLEČEK<sup>2</sup>, O. HEGEDUS<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Univerzita Konštantína Filozofa, Fakulta prírodných vied, Katedra chémie, Tr. A. Hlinku, 1, 949 74 Nitra*

<sup>2</sup>*Univerzita Konštantína Filozofa v Nitre, Fakulta prírodných vied*

Korešpondenčný autor: [ahegedusova@ukf.sk](mailto:ahegedusova@ukf.sk)

Zníženie rizika anorganických kontaminantov možno riešiť remediáciou prvkov znečisteného prostredia voľbou najvhodnejších technológií. Pri voľbe dekontaminačných technológií treba brať do úvahy možnosti ich aplikácií na také kontaminované pôdy, na ktorých sa odohrávajú ich prirodzené premeny, čím sa znižujú ich ekologické riziká. V predkladanom príspevku sú výsledky vplyvu vybranej chelátotvornej látky na zníženie obsahu mobilných a potenciálne mobilizovateľných foriem kadmia z kontaminovaného modelového substrátu pomocou rastliny - hyperakumulátora (kukurica), využitím techniky indukovanej fytoextrakcie.

## IMISNÁ ZÁŤAŽ OVZDUŠIA PONITRIANSKEJ OBLASTI SÍROU V SR

P. LAZOR, J. TOMÁŠ, T. TÓTH

*Katedra chémie, Fakulta biotechnológie a potravinárstva, SPU v Nitre, Tr. A. Hlinku 2, 949 01 Nitra*

Korešpondenčný autor: [peter.lazor@uniag.sk](mailto:peter.lazor@uniag.sk)

Na území Slovenska je imisná situácia zhoršená najmä v lokalitách s vysokou koncentráciou priemyslu, kde prevláda najmä oxid siričitý a oxidy dusíka. Kvalita ovzdušia Ponitrianskej oblasti je ovplyvňovaná predovšetkým energetickým a chemickým priemyslom, kde dominantné postavenie má Elektráreň Nováky. Nezanedbateľne sa na vysokej úrovni znečistenia ovzdušia v tejto lokalite podieľa aj nízka kvalita palivovo - energetických zdrojov, v ktorých sa využíva uhlie s vyšším obsahom síry a arzenu. Merania prízemných koncentrácií imisíí zlúčenín síry sme realizovali sorpčno - kumulatívnu metódou v rokoch 2001 - 2005 na stanovištiach Bystričany a Diviaky nad Nitricou, v lokalite dominantného imisného zdroja SEZ Zemianske Kostol'any. Stanovište na Agrometeorologickej stanici Nitra - Malanta bolo kontrolné. Výsledky sme vyjadrili ako plošný spad SO<sub>2</sub> ktorý predstavoval za obdobie 1.1.2001 - 31.12. 2005 na stanovišti Bystričany 17,3 mg.m<sup>-2</sup>.d-1SO<sub>2</sub>, Diviaky nad Nitricou 19,3 mg.m<sup>-2</sup>.d-1SO<sub>2</sub> a Nitra - Malanta 16,9 mg.m<sup>-2</sup>.d-1SO<sub>2</sub>. Hodnoty spadu zlúčenín SO<sub>2</sub> sme prepočítali na obsahovú koncentráciu: Bystričany 22,6 μg.m<sup>-3</sup> SO<sub>2</sub>; Diviaky nad Nitricou 25,0 μg.m<sup>-3</sup> SO<sub>2</sub>; Nitra - Malanta 22,7 μg.m<sup>-3</sup> SO<sub>2</sub>. Na stanovišti Bystričany bola prekročená kritická úroveň SO<sub>2</sub> 0,7 - 5,2 μg.m<sup>-3</sup> počas celého sledovaného obdobia 2001 - 2005. V lokalite Di-



viaky v období 2002 - 2005 v rozsahu 1,8 - 12,9  $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ . Na stanovišti v Nitre len v období 2002 - 2004 o 1,5 - 13,3  $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$  SO<sub>2</sub>. Namerané zmeny koncentrácií SO<sub>2</sub> počas vegetačného a mimovegetačného obdobia korešpondujú s teoretickými zmenami zákonitostí spadu v jednotlivých mesiacoch roka a závisia od konkrétnej meteorologickej situácie.

Práca vznikla podporou a spolufinancovaním projektom VEGA 1/4435/07

- [1] KLINDA, J., LIESKOVSKÁ, Z. 2007. Správa o stave životného prostredia v Slovenskej republike v roku 2005. Bratislava : MŽP SR, SHMÚ. 252 s. 2007. ISBN 80-88833-43-4.
- [2] KOLEKTÍV. 2006. Správa o kvalite ovzdušia a podiele jednotlivých zdrojov na jeho znečistení v Slovenskej republike 2005. I. vyd. Bratislava : MŽP SR, SHMÚ, 2006.
- [3] VOLLMANNOVÁ, A.- LAHUČKÝ, L.- BYSTRICKÁ, J. 2006. Bezpečnosť plodín dopestovaných v okolí Niklovej huty Sereď z pohľadu obsahu ťažkých kovov. In: Bezpečnosť a kvalita surovín a potravín. II. Ved. konferencia s medzinárodnou účasťou, 9.11.2006. Nitra: SPU, 2006, s. 501-507. ISBN 80-8069-767-1

## SELENIZÁCIA PÔD AKO ÚČINNÁ FORMA OBOHATENIA POŽÍVATÍN SELÉNOM

O. HEGEDUS<sup>1</sup>, A. HEGEDUSOVÁ<sup>1</sup>, A. VARGOVÁ<sup>1</sup>, V. PAVLÍK<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Konštantína Filozofa, Fakulta prírodných vied, Katedra chémie, Tr. A. Hlinku, 1, 949 74 Nitra

<sup>2</sup>FPV UKF v Nitre, RÚVZ so sídlom v Nitre

Korešpondenčný autor: labodbor@zoznam.sk

Cieľom práce bolo sledovať transfer selénu vo vybraných zeleninových druhoch cestou fortifikácie pôd anorganickými soľami selénu. Selén je biogénny prvok, jeho najvýznamnejšou úlohou je, že je súčasťou enzýmu glutatiónperoxidázy. Je nevyhnutný pre tvorbu hormónu štítnej žľazy, pre zdravú pokožku, vlasy, zachovanie zraku. Spolu s vitamínom E pomáha v prevencii proti rakovine a srdcovocievny chorobám [1]. Ľudský organizmus pre svoje potreby najľahšie prijíma selén viazaný v organických zlúčeninách [2].

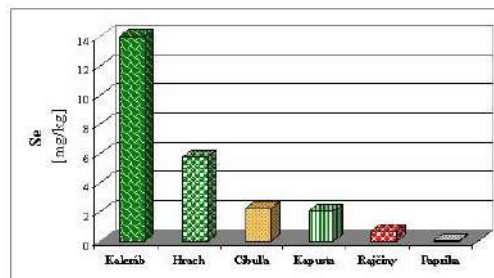
Rastliny, ktoré obsahujú priemerné množstvo síry, ako napr. kapusta, majú tendenciu akumulovať viac selénu ako rastliny s nízkym obsahom síry [3].

Príjem pôdneho selénu je vo veľkej miere ovplyvnený rastlinným druhom. Jednotlivé sledované zeleninové druhy nekumulovali do pôdy pridaný selén rovnakou intenzitou.

Kým hrach záhradný, kaleráb a cibuľa vykazujú veľmi intenzívnu kumuláciu selénu, plodová zelenina intenzívnu kumuláciu nevykazuje (rajčiny, paprika).

Výsledky naznačujú, že pod zeleninové druhy ako rajčiny a paprika, nie je rizikové uskutočniť selenizáciu pôd. Iná je situácia v prípade „kumulátorov“ (hrach záhradný, kaleráb, cibuľa), pre ktoré zeleninové druhy selenizácia pôd sa musí viesť opatrne, aby v jedlých častiach dopestovanej zeleniny, vzhľadom na ich spotrebu, nedošlo k prekročeniu svetovou zdravotníckou organizáciou stanovenej najvyššej dávky, t.j. 0,023  $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$  telesnej hmotnosti za deň (LOAEL - Lowest Observed Adverse Effect Level).

- [1] Baghour M., Moreno D.A., Hernandez J., Castilla N., Romero L.: J. Environ. Sci. Health, A 6, 1075 (2002).
- [2] Greger J. L.: Nutrition Today 36, 97 (2001).
- [3] Simon L., Széles É., Kovács B., Prokisch J., Győru Z.: Proceedings of the International Symposium on Trace Elements in the Food Chain. Budapest, May 25-27, 2006. (Ed.: Szilágyi, M., Szentmihályi K.). Working Committee on Trace Elements of the Complex Committee Hungarian Academy of Sciences and Institute of Material and Environmental Chemistry of the Hungarian Academy of Sciences. Budapest, Hungary. pp. 40-44. (ISBN 963 7067 132).



Príjem selénu zeleninovými druhmi po fortifikácii pôd selénom sodným v množstve 1  $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$

## VPLYV NEPRIAZNIVÝCH FAKTOROV NA OXIDÁCIU TUKOV

S. SEKRETÁR, Š. SCHMIDT, L. ZAHRADNÍKOVÁ, L. JANÁČ, O. ZUFAROV

Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav biotechnológie a potravinárstva

Korešpondenčný autor: stanislav.sekretar@stuba.sk

Jedlé tuky, oleje a potravinárske výrobky z nich vyrobené sú v priebehu výroby, skladovania a použitia vystavené mnohým nepriaznivým faktorom, ktoré iniciujú

ich oxidáciu (zvýšená teplota, svetlo, singletový kyslík, mikrovlnný ohrev, obsah iónov ťažkých kovov atď.)(1). Tieto faktory často pôsobia súčasne a ich účinok sa tak znásobuje. Najčastejšie sa vyskytujú kombinácie: tepelné namáhanie (pečenie) + svetlo; svetlo + singletový kyslík; mikrovlnné žiarenie + zvýšená teplota. Ochranou pred účinkom týchto faktorov býva obyčajne prídavok antioxidantov pôsobiacich látok[2], vhodné balenie a skladovanie[3]. Bol preskúmaný vplyv akceleračných faktorov oxidácie (svetlo, singletový kyslík, kovové ióny, vysoká teplota, mikrovlnný ohrev) na oxidačnú stabilitu tukov (slnečnicový a repkový olej, bravčová masť) pri ich skladovaní v rôznych obaloch, pri zrýchlených testoch (Rancimat pri 120 °C, Oxidograph pri 110 °C, pri fritovacej teplote 170 °C). Výsledky poukazujú na výrazné akceleračné účinky svetla a singletového kyslíka už pri skladovaní pri laboratórnej teplote (peroxidové číslo slnečnicového oleja po 49 dňoch skladovania na svetle bolo 240 oproti 14 v tme). Pri fritovacej teplote (170 °C, 8 h) bol repkový olej 1,5-násobne stabilnejší než slnečnicový. Prídavok 0,2 % lecitínu výrazne zlepšil oxidačnú stabilitu oboch olejov (polovičná hodnota p-anizidínového čísla po 8 h ohrevu) i bez prídavku antioxidantov. Pri mikrovlnnom ohreve bola pozorovaná oxidácia už po 4-6 min ohrevu, kedy teplota substrátu presiahla 100 °C. Oxidáciu sa podarilo spomaliť na úroveň porovnateľnú so 150 °C klasickým ohrevom až 0,1 % prídavkom antioxidantov (rozmarínový extrakt, BHT). Bol pozorovaný aj výrazný prooxidačný účinok mednatých iónov (50-70 % pokles indukčnej periódy oproti kontrole).

Táto práca bola uskutočnená s finančnou podporou grantu VEGA 1/2392/05.

- [1] Choe, E., Min, D. B.: Chemistry and reactions of reactive oxygen species in foods. Crit. Rev. Food Sci. Nutr. 2006, 46, s. 1-22.
- [2] Sekretár, S., Schmidt, Š., Vajdák, M., Zahradníková, L., Annus, J.: Antioxidative and antimicrobial effects of some natural extracts in lard. Czech J. Food Sci. 2004, 22, s. 215-218.
- [3] Sekretár, S., Schmidt, Š., Zahradníková, L. Úloha obalov pri balení a skladovaní potravín ChemZi, 2005, 1, s. 105.

### ÚČINKY $\text{Cu}^{2+}$ NA RAST A TVORBU FOTOSYNTETICKÝCH PIGMENTOV SEMENÁČIKOV JEDNOKLÍČNOLISTOVÝCH A DVOJKLÍČNOLISTOVÝCH RASTLÍN

M. MOLNÁROVÁ, A. FARGAŠOVÁ

Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra ekozozológie a fyziotaktiky

Korešpondenčný autor: molnarova@fns.uniba.sk

Med' je pre rastliny esenciálnym prvkom a je súčasťou viacerých enzýmov zahrnutých do transportu elektrónov a redox reakcií. Vo vyšších koncentráciách má toxický účinok, ktorý sa prejavuje inhibíciou rastu a zmenou permeability plazmatickej membrány. V rastlinách má v porovnaní s inými prvkami nízku mobilitu a väčšina medi zostáva hlavne v koreňoch a listoch, až kým ich pletivá nezostarnú. Do mladých pletív sa presúva len v malom množstve, čo v prípade nedostatku Cu môže viesť k prejavom symptómov deficitu. V koreňoch je Cu naviazaná hlavne na bunkové steny a preto je veľmi ťažko mobilná. Najvyššia koncentrácia Cu je v nadzemnej časti rastlín v období ich intenzívneho rastu a počas nadbytku Cu v prostredí.

V testoch sa hodnotil inhibičný účinok medi na rast koreňov, výhonkov a tvorbu fotosyntetických pigmentov (chlorofylu a, chlorofylu b a karotenoidov) dvojkľúčnolistových (horčice *Sinapis alba*, odroda Severka; repky *Brassica napus*, odroda Bristol) a jednokľúčnolistových rastlín (pšenice *Triticum aestivum*, odroda Šárka; jačmeňa *Hordeum vulgare*, odroda Orthega). Inhibícia sa vyjadrovala ako nominálna  $\text{IC}_{50}$  hodnota vypočítaná probitovou analýzou a jej porovnaním sa stanovila aj citlivosť testovaných druhov rastlín. Z výsledkov, uvedených v Tabuľke, je zrejmé, že Cu najviac inhibovala rast koreňov dvojkľúčnolistových rastlín - horčice ( $\text{IC}_{50} = 59 \text{ mg/l}$ ) a repky ( $\text{IC}_{50} = 216 \text{ mg/l}$ ). O obilninách je známe, že z pôdy absorbujú len zanedbateľné množstvo Cu, čo sa v testoch odrazilo vo vysokých  $\text{IC}_{50}$  hodnotách stanovených pre inhibíciu rastu koreňa ako jačmeňa ( $\text{IC}_{50} = 858 \text{ mg/l}$ ) tak aj pšenice ( $\text{IC}_{50} = 1007 \text{ mg/l}$ ). Rast výhonkov semenáčikov nebol med'ou významne inhibovaný ani pri jednom testovanom rastlinnom druhu, čo poukazuje na slabú translokáciu kovu z koreňov do nadzemných častí rastlín. Najvýraznejšie boli inhibované hladiny chlorofylu a, chlorofylu b a karotenoidov u repky (153 mg/l, 151 mg/l, resp. 177 mg/l). Medzi hladinami chlorofylu a, chlorofylu b a karotenoidmi v jednej rastline nebola pozorovaná výrazná zmena.

Projekt bol financovaný grantami VEGA 1/4361/07 a UK/133/2007.

	koreň	výhonok	chlorofyl a	chlorofyl b	karotenoidy
	$\text{IC}_{50}$ (mg/l)	$\text{IC}_{50}$ (mg/l)	$\text{IC}_{50}$ (mg/l)	$\text{IC}_{50}$ (mg/l)	$\text{IC}_{50}$ (mg/l)
<i>Sinapis alba</i>	59 (45-78)	1406 (905-2183)	218 (180-262)	368 (195-698)	284 (226-356)
<i>Brassica napus</i>	216 (166-282)	1083 (473-2482)	153 (124-188)	151 (123-186)	177 (139-225)
<i>Triticum aestivum</i>	1007 (671-1512)	1341 (873-2059)	2704 (2423-3018)	2592 (2325-2889)	2912 (2609-3251)
<i>Hordeum vulgare</i>	858 (563-1308)	690 (531-898)	n.d.	n.d.	15239586 (5533491-41970785)

Inhibičný účinok  $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  na rast koreňov, výhonkov

a tvorbu fotosyntetických pigmentov (chlorofyl a, chlorofyl b a karotenoidy) jednodielnych a dvojdielnych semenačikov. Uvedené sú hodnoty IC50 a ich 95 % intervaly s

## Prednášky – sekcia 6

### STUDIUM VLIVU ROZPOUŠŤEDLA NA HYDROGENACI NITRILŮ

J. KRUPKA, Z. NEBŘENSKÁ, J. PAŠEK

Vysoká škola chemicko-technologická Praha

Korešpondenčný autor: Jiri.Krupka@vscht.cz

Práce se zabývala studiem vlivu rozpouštědla na průběh hydrogenace nitrilů. Byla sledována selektivita a reakční rychlost hydrogenace modelového substrátu - butyronitrilu na niklovém a palladiovém katalyzátoru při teplotě 373 K a tlaku 5 MPa v 19 rozpouštědlech. Bylo zjištěno, že rychlost hydrogenace je dramaticky ovlivněna použitým rozpouštědlem. Dále bylo zjištěno, že řádové rozdíly v reakčních rychlostech nejsou způsobeny jen různou rozpustností vodičku v reakční směsi, ale jsou dány i vlastnostmi rozpouštědla. Vliv rozpouštědla na rychlost a selektivitu hydrogenace byl kvantifikován empirickou metodou vícerozměrné lineární regrese s použitím modelu Abrahama-Kamleta-Tafta. Tento model vyjadřuje celkové ovlivnění prostředím jako součet příspěvků, které jsou důsledkem různých typů interakcí mezi molekulami substrátu a rozpouštědla. Selektivitu na obou použitých katalyzátorech bylo možné tímto modelem dobře hodnotit, ale mezi výslednou reakční rychlostí hydrogenace modelového nitrilu a fyzikálně-chemickými vlastnostmi rozpouštědla nebyla nalezena žádná lineární závislost. Výsledky ukázaly, že zatímco selektivita na niklovém katalyzátoru je nejvíce ovlivněna protondonorní schopností rozpouštědla pro tvorbu vodičkové vazby, na palladiovém katalyzátoru selektivita k primárním aminům roste s rostoucí hodnotou Hildebrandovy charakteristiky kohezivní energie prostředí.

Práce vznikla za finanční podpory projektu CEZ: MSM 6046137301.

### ŠTRUKTÚRA A VLASTNOSTI TEXTÍLIÍ ZO ZMESI BAMBUSOVÝCH A BAVLNENÝCH VLÁKIEN

J. VNENČÁKOVÁ<sup>1</sup>, M. JAMBRICH<sup>2</sup>, K. LUKÁČOVÁ<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Výskumný ústav chemických vláken a.s., Štúrová 2, 059 21 Svit

<sup>2</sup>Trenčianska univerzita, Fakulta priemyselných technológií, Katedra chémie a technológie polymérov a textílu

<sup>3</sup>Fakulta priemyselných technológií TnUAD, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov

Korešpondenčný autor: dsiflat@vuchv.sk

Prednáška je zameraná na štúdium štruktúry a vlastností bambusových vlákien a vláknitých materiálov-tkanín zo zmesi bambusových a bavlnených vlákien. Oba typy vlákien majú molekulovú štruktúru charakterizovanú ako typ polysacharidov, resp. celulózoým polymérom. Bavlna predstavuje prírodné vlákno a bambusové vlákno regenerát celulózy podobne ako viskózoým vlákna. Bambusové vlákna sa získavajú z rýchlorastúcej traviny-bambusu. V ostatnom období sa aplikácia bambusových vlákien v rôznych textilných výrobkoch pomerne rýchlo rozširuje. Dôvodom využívania bambusových vlákien v textilných výrobkoch je jednak zlepšenie fyziologických a úžitkových vlastností textílií a tiež ekonomický aspekt v porovnaní s aplikáciou bavlnených vlákien. Bambus patrí do čeľade tráv ktoré majú mnohoročný stvol a môžu rásť od subtrópov až po večne zamrznuté polárne kraje. Je to rýchlorastúca rastlina, ktorá za priaznivých pôdnych a klimatických podmienok narastie až o 80 cm za 24 hod. Za 3-4 roky sa vypestuje bambus v ktorom polymérny reťazec celulózy má požadovanú molekulovú štruktúru potrebnú pre dobré vlastnosti vlákna. Dlhodobým štúdiom bambusu sa zistilo, že obsahuje antibaktériu bio-agenta nazvaného „bamboo KUN“, ktorý sa zachová vo vlákne i po viacerých operáciách jeho úprav. Prírodná antibaktéria v bambusovom vlákne sa výrazne odlišuje od syntetického bakteriostatika. Naše experimentálne práce boli zamerané na hodnotenie štruktúry a vlastností bambusových, bavlnených a viskózoým vlákien a na hodnotenie fyzikálno-mechanických, fyziologických a úžitkových vlastností tkanín zo zmesi bambusových a bavlnených vlákien. Získané experimentálne výsledky nám umožňujú vysloviť záver, že aplikácia bambusových vlákien v textilných výrobkoch je prínosom k zvýšeniu ich niektorých úžitkových vlastností v porovnaní s vlastnosťami z bavlny. Bambusové vlákna sú perspektívnym surovinovým zdrojom pre prípravu širokého sortimentu textilných výrobkoch.

Kolektív autorov d'akuje organizátorom konferencie za možnosť prezentácie ich výsledkov.

- [1] Fiber Organon, Vol. 77, No.6, june 2006
- [2] Jambrich, M., Murárová, A., Džubas, F.: Aspekty rozvoja celulózoým vlákien, 2003
- [3] Barborák, O.: Odevníctvo I., 2001

### Vliv štruktúry uhlovodíků na jejich chování při pyrolýze

L. STARKBAUMOVÁ, P. ZÁMOSTNÝ, Z. BĚLOHLAV

Vysoká škola chemicko-technologická Praha

Korešpondenčný autor: petr.zamostny@vscht.cz

Tato práce byla zaměřena na studium vlivu struktury acyklických, cyklických a aromatických uhlovodíků na jejich chování při pyrolýze a vysvětlení odlišností na úrovni jednotlivých uhlovodíků i jejich skupin. Chování uhlovodíků bylo studováno laboratorní pyrolýzní plynovou chromatografií z hlediska selektivity tvorby primárních pyrolýzních produktů a reaktivity testovaných uhlovodíků při individuální pyrolýze i kopyrolýze s modelovým benzinem.

Experimenty byly koncipovány tak, aby umožnily sledovat vliv délky uhlíkatého řetězce a substituentu, velikosti, počtu a vzájemné vazby karbocyklů, polohy, počtu a druhu substituentu a polohy a počtu dvojných vazeb, a to jak na reaktivitu, která je funkcí počtu vazeb C-H a jejich pevností, tak i na selektivitu k tvorbě primárních produktů pyrolýzy testovaných uhlovodíků.

Z laboratorních experimentů vyplynulo, že distribuci produktů pyrolýzy lze jednoduše předpovídat pouze u lineárních alkanů, kde platí, že s rostoucí délkou řetězce vzniká více vyšších olefinů. Isoalkany, cyklické a aromatické uhlovodíky mají distribuci produktů různorodou a velmi výrazně závislou na struktuře daného uhlovodíku. Reaktivita uhlovodíků, významně závisela na tom, zda pyrolýza byla vystavena testovaná sloučenina ve směsi nebo samostatně. Reaktivita lineárních alkanů rostla s rostoucí délkou řetězce. Reaktivita isoalkanů za pyrolýzních podmínek rostla s rostoucím počtem methylových substituentů a na jejich poloze v molekule byla téměř nezávislá. Reaktivita cyklických uhlovodíků rostla se zvyšujícím se počtem uhlíků v cyklu, s rostoucí délkou substituentu i s rostoucím počtem substituentů. Vliv aktivních radikálů z rozkladu benzínu na konverzi nenasycených cyklů byl minimální. Ani u vícesubstituovaných uhlovodíků se reaktivita ve směsi s modelovým benzinem významně neměnila.

*Autoři děkují za finanční podporu poskytnutou v rámci výzkumného záměru MSM 6046137301 MŠMT.*

## Postery – sekcia 1

### 1Po-Po1

#### NEKATALYZOVANÉ BROMIČNANOVÉ OSCILÁTORY S ASPIRÍNOM RESP. KYSELINOU SALICYLOVOU AKO SUBSTRÁTMI A VPLYV SURFAKTANTOV

D. MIŠIČÁK, P. ŠEVČÍK, L. ADAMČÍKOVÁ

*Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Bratislava*

Korešpondenčný autor: [misicak@fns.uniba.sk](mailto:misicak@fns.uniba.sk)

Nedávno sme popísali nový bromičnanový oscilátor so substrátom aspirínom (kyselina acetylsalicylová)<sup>1</sup>. Osciláciám predchádza dlhá indukčná perióda (IP), ktorá sa skracovala so starnutím zásobného roztoku aspirínu. Je známe, že aspirín podlieha hydrolyze, ktorá je hlavnou príčinou nestálosti roztokov aspirínu. Nepriamou metódou, na základe merania IP sme určili rýchlostnú konštantu hydrolyzy aspirínu<sup>2</sup>. Reakčné produkty hydrolyzy aspirínu sú kyselina salicylová (SA) a octová. Predpokladáme, že kyselina salicylová môže byť „aktívnym substrátom“ zodpovedným za oscilácie v systéme bromičnan - aspirín. Ukázalo sa, že systém  $\text{BrO}_3^-$  - SA skutočne generuje oscilácie. Napríklad 0,01 M SA; 0,04 M  $\text{NaBrO}_3$  a 1,5 M  $\text{H}_2\text{SO}_4$  pri 40°C a miešani 50 rpm dáva 4 oscilácie. Systém pravidelne osciluje aj bez miešania, naopak, pri 400 rpm sú oscilácie inhibované.

Vplyv  $\text{O}_2$  sa študoval v systéme  $\text{BrO}_3^-$  - SA (A) aj v systéme  $\text{BrO}_3^-$  - aspirín (B). Reakčné zmesi sa 20 min prebublávali inertným plynom dusíkom pred pridaním dobre prebublanej poslednej komponenty. V prípade systému B, kde je dlhá IP, sa dusík vhaňal nad roztok počas priebehu celej oscilačnej reakcie. Kyslík nemal vplyv na oscilačné parametre (IP, počet a frekvencia oscilácií) ani v systéme A ani B.

Študovali sme vplyv dvoch surfaktantov, kationového cetyltrimetyl amónium nitrátu (CTAN) a neiónového Triton X-100 (TX-100) na obidva oscilátory. Pridanie CTANu a TX-100 do oscilátora B sa prejavilo ich vplyvom na IP. TX-100 má inhibičný účinok na oscilátor A, zatiaľ čo  $1 \times 10^{-4}$  M nemal vplyv na oscilácie, pridanie  $5 \times 10^{-4}$  M surfaktantu ich úplne potlačilo. Predpokladáme vznik micel, ktoré ovplyvňujú niektoré kľúčové kroky mechanizmu.

*Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA MŠ SR č. 1/3570/06.*

- [1] Adamčíková L., Mišicák D., Ševčík P.: *React. Kinet. Catal. Lett.* 85, No. 2, 215-221 (2005).
- [2] Adamčíková L., Mišicák D., Ševčík P.: *Collect. Czech. Chem. Commun.*, Vol. 71, No. 10, 1445-1452 (2006).
- [3] Field R. J., Burger M.: *Oscillations and Traveling Waves in Chemical Systems*, Wiley - Interscience, New York (1985).

### 1Po-Po2

#### SUPERSATURÁCIA V KATALYZOVANOM BROMIČNANOVOM OSCILÁTORE S KYSELINOU ACETÓNDIKARBOXYLOVOU

D. MIŠIČÁK, L. ADAMČÍKOVÁ, P. ŠEVČÍK

*Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Bratislava*

Korešpondenčný autor: *sevcik@fns.uniba.sk*

Acetón dikarboxylová kyselina (ADA) dokáže produkovať vo vodných roztokoch supersaturované roztoky oxidu uhličitého spontánnym rozkladom na acetón a  $\text{CO}_2$  v špeciálnych podmienkach<sup>1</sup>. Prah pre homogénnu nukleáciu bubliniek oxidu uhličitého v roztoku  $\text{NaClO}_4$  môže dosahovať 0,3 - 0,4 mol  $\text{dm}^{-3}$ , čo je približne 10 násobok rovnovážnej rozpustnosti, ktorá je 0,034 mol. $\text{dm}^{-3}$  pri 101,3 kPa a 25 °C.

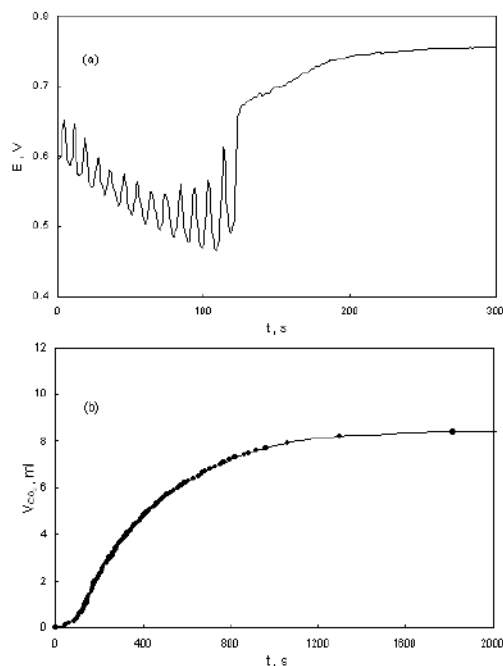
Zdá sa, že ADA je dobrým kandidátom na úvahy, či fyzikálne procesy spojené so supersaturáciou a vývojom plynného  $\text{CO}_2$  by mohli spätne ovplyvňovať chemické procesy, ktoré vedú k tvorbe plynu a takto modifikovať oscilačné parametre bromičnanových oscilátorov. V tomto príspevku je opísaná tvorba supersaturovaného roztoku oxidu uhličitého v oscilačnej reakcii Belousov - Žabotinského (BŽ) typu s acetón dikarboxylovou kyselinou ako substrátom.

Našli sa podmienky, v ktorých potenciál platinovej redoxnej elektródy vykazuje oscilácie v reakcii bromičnanových iónov s ADA, katalyzovanej Mn(II) iónmi v kyslom prostredí. Merala sa aj časová závislosť objemu produkovaného plynného  $\text{CO}_2$ , metódou zavedenou k monitorovaniu produkcie plynného kyslíka v Brayovej - Liebafského oscilačnej reakcii<sup>2</sup>. Vývoj oxidu uhličitého a charakter závislosti pri miernom miešaní naznačuje autokatalytickú reakciu a/alebo tvorbu supersaturovaného roztoku  $\text{CO}_2$  v oscilačnej reakcii s ADA (Obr.1). Perturbačný experiment, v ktorom pôvodne nemiešaný reakčný systém s bromičnanovými iónmi, ADA a katalyzátorom v kyslom prostredí bol po 1000s náhle zamiešaný, tvorbu supersaturovaného roztoku oxidu uhličitého v oscilačnej reakcii BŽ typu s ADA potvrdil.

*Táto práca bola podporovaná grantom VEGA MŠ SR 1/3570/06.*

[1] Bowers P. G., Noyes R. M.: J. Am. Chem. Soc., 1983, 105, 2572.

[2] Ševčík P., Kissimonová K., Adamčíková L.: J. Phys. Chem. A, 2000, 104, 3958.



Dynamika BŽ reakcie s ADA. (a) Pt redox potenciál; (b) Objem produkovaného oxidu uhličitého.

### 1Po-Po3

## ŠTÚDIUM VPLYVU ANIÓNOVÉHO, KATIÓNOVÉHO A NEIÓNOVÝCH SURFAKTANTOV NA NEKATALYZOVANÚ OSCILAČNÚ REAKCIU FENOLU S BROMIČNANOM V KYSLOM PROSTREDÍ

O. GRANČIČOVÁ, A. OLEXOVÁ, T. ZACHER

Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta

Korešpondenčný autor: *grancicova@fns.uniba.sk*

Reakcia fenolu s bromičnanom sodným v kyslom prostredí prebieha za určitých podmienok ako typická nekatalyzovaná oscilačná reakcia (UBO) s pomerne malým počtom oscilácií [1,2]. V roku 2001 Adamčíková a Ševčík [3] zistili, že v danom miešanom systéme existujú dva typy oscilačných režimov oddelených neoscilačnou fázou. Následné oscilácie sú charakteristické pre systémy spriahnuté cez chemické reakcie medzi reaktantami, medziproduktami alebo produktami.

K objasneniu mechanizmu oscilačného chovania systému môže prispieť štúdium tejto reakcie v micelárnom roztoku. Vplyv rastúcej koncentrácie katiónového ( $\text{CTANO}_3$ ), aniónového (SDS) a dvoch neiónových surfaktantov (BRIJ-30 a TRITON X-100) na obidva oscilačné režimy UBO s fenolom ako substrátom sa študoval pri teplote 25 °C v miešanom systéme. Vplyv rastúcej koncentrácie surfaktantu sa prejavil na oscilačných parametroch: na miernom raste indukčnej periódy I. oscilácií, na výraznom raste indukčnej periódy II. oscilácií a postupnom poklese počtu I. a II. oscilácií

až do ich úplného vymiznutia. V zmenách oscilačných parametrov sa odráža solubilizácia fenolu a produktov bromácie fenolu v micely, inhibícia bromácie aromatického substrátu v dôsledku solubilizácie brómu a katalytický vplyv nabitého povrchu micely.

Detailnejšie informácie o zložení reakčnej zmesi po skončení I. indukčnej periódy, teda pred nástupom prvých oscilácií, po skončení II. indukčnej periódy a po skončení druhých oscilácií poskytlá metóda SIMS.

*Táto práca vznikla s podporou grantu VEGA MŠ SR č. 1/3570/06.*

- [1] Orbán M., Körös E., Noyes R. M.: *J. Phys. Chem.* 83, 3056 (1979).
- [2] Tockstein A., Handlířová M.: *Collect. Czech. Chem. Commun.* 47, 2454 (1982).
- [3] Adamčíková L., Farbulová Z., Ševčík P.: *New. J. Chem.* 25, 487 (2001).

#### 1Po-Po4

### BILE ACID-PORPHYRIN CONJUGATES: AS NEW SENSOR FOR CANCER SACCHARIDES BIOMARKERS

Z. KEJIK<sup>1</sup>, V. KRÁL<sup>2</sup>, J. KRÁLOVÁ<sup>3</sup>, J. KOIVUKORPI<sup>4</sup>, K. SIEVÄNEN<sup>4</sup>, E. KOLEHMAINEN<sup>4</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Chemical Technology*

<sup>2</sup>*Vysoká škola chemicko-technologická Praha*

<sup>3</sup>*Institute of Molecular Genetics, Academy of Sciences*

<sup>4</sup>*University of Jyväskylä*

Korešpondenčný autor: zkejik@centrum.cz

Recently, a slight decline in the incidence of cancer has been achieved worldwide, but still long-term mortality rates remain high. For successful therapy, early diagnosis of cancer plays the key role. For decades, the microscopy of biopsy samples has represented the principal diagnostic method. However, this method suffers from subjectivity and limited ability to detect the early events of cancer. To fulfill the demand of the as early as possible diagnostics, new modern tools have to be found and applied. It is well known that when a tumor is detected, certain changes on the molecular level have already occurred. The main goal of the new diagnostic approaches is to recognize these changes as early as possible. This recognition can be based on a specific interaction of diagnostic sensor with suitable molecular partners; cancer biomarkers (e.g., proteins, saccharides). For recognition of cancer saccharides biomarkers (heparan sulfate, hyaluronic a sial acid) bile acid-porphyrin conjugates were tested. High selectivity for saccharide cancer markers and cancer cells were observed.

*The authors acknowledge Academy of Finland (project no. 7105950) for financial support. This work was funded by grant from the Grant Agency of the Czech Republic (Grant No. 203/06/1038) and supported in part by project LC06077 awarded by the Ministry of Education of the Czech Republic MSM and by project AV0Z50520514 awarded by the Academy of Sciences of the Czech Republic to J.K*

#### 1Po-Po5

### CHOVÁNÍ LIGNITU VE VODNÉM PROSTŘEDÍ

P. BUŠINOVÁ<sup>1</sup>, M. PEKAŘ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav fyzikální a spotřební chemie*

<sup>2</sup>*Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická*

Korešpondenčný autor: businova@fch.vutbr.cz

Lignit je po dlhou dobu využívaný jako sice málo kvalitní, přesto však použitelné a levné palivo. Spalování lignitu však představuje plýtvání cenným materiálem a hodnotnou chemickou surovinou. Díky svému nízkému stupni prouhelnění a tomu odpovídající chemické a fyzikální struktuře má lignit potenciál mnohem kvalitnější zhodnocení v jiných technologiích, např. sorných, zemědělských, technologiích péče o půdu a rekultivace krajiny nebo jako zdroj huminových kyselin. Může být často využit i přímo v přírodním stavu, což je z ekonomického hlediska nejméně nákladná aplikace. Při nasazení v přírodním prostředí je však důležité mít informace o jeho chování ve vodném prostředí, stručně řečeno loužení ve vodě a vodných roztocích elektrolytů. Organické i anorganické složení lignitu je velmi pestré a uvolňování nežádoucích komponent by mohlo jeho vlastní aplikaci znehodnotit. Tento příspěvek je věnován loužení drčeného jihomoravského lignitu. Jako loužící činidlo byla použita voda, vodné roztoky NaCl, KCl, směsi CaCl<sub>2</sub> s DTPA a roztoky HCl nebo NaOH o různém pH. Loužení probíhalo jednak dle postupu popsaného normou ČSN EN 13651 nebo 13625, jednak v jeho modifikaci spočívající v prodloužení doby loužení nebo v opakovaném loužení. Výluhy byly hodnoceny dle hodnoty pH, vodivosti, obsahu prvků a vybraných organických sloučenin. Výsledky ukazují, že normované loužení nevybočuje z řady jiných přírodních surovin (rašelina, kůra, kompost) a že s opakovaným loužením koncentrace uvolňovaných látek rychle klesá. Lignitové výluhy by v přírodním vodném prostředí neměly vést k jeho nežádoucí kontaminaci.

*Projekt byl realizován za finanční podpory ze státních prostředků prostřednictvím Grantové Agentury České republiky, č. 105/05/0404.*

## 1Po-Po6

## SROVNÁNÍ METOD STUDIA SORPČNÍCH VLASTNOSTÍ MONTMORILLONITU

Z. NAVRÁTILOVÁ<sup>1</sup>, Z. HRANICKÁ<sup>2</sup>, M. KALUSOVÁ<sup>2</sup>, L. VACULÍKOVÁ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústav geoniky AV ČR, v.v.i.

<sup>2</sup>Ostravská Univerzita v Ostravě

Korešpondenční autor: zuzana.navratilova@osu.cz

Sorpční vlastnosti montmorillonitu (MMT) byly studovány klasickou vsádkovou technikou a pomocí voltametrie na elektrodě modifikované montmorillonitem.

Sorpce  $\text{Cu}^{2+}$  byla prováděna na třech typech montmorillonitu - MMT SWy-2 (naleziště Crook County, USA), MMT SAz-1 (naleziště Apach County, USA) a MMT JP (naleziště Jelšový Potok, Slovensko). Charakterizace použitých vzorků byla provedena již dříve [1]. Uhlíková pastová elektroda modifikovaná montmorillonity byla připravena klasickým způsobem [1].

Sorpce  $\text{Cu}^{2+}$  klasickou vsádkovou technikou byla prováděna ve vodném a acetátovém prostředí [2]. Hodnoty maximálně naadsorbovaného množství  $\text{Cu}^{2+}$  pro jednotlivé montmorillonity ve vodném prostředí odpovídají 27,9 - 41,4 % z celkové kationtové výměnné kapacity. V prostředí acetátového pufru pH 3,6 hodnoty významně klesly na 12,9 - 16,6 % celkové výměnné kapacity. Získané sorpční izotermy se řídily Langmuirovou závislostí. Nejvyšší sorpční schopnost pro  $\text{Cu}^{2+}$  byla zjištěna na montmorillonitu SWy-2.

Voltametrií na uhlíkové pastové elektrodě modifikované vybranými montmorillonity byla rovněž prokázána sorpce  $\text{Cu}^{2+}$  [3]. Opakovaná cyklická voltametrie poskytla časové závislosti sorpce, pomocí kterých byla zjišťována kinetika adsorpce. Bylo zjištěno, že sorpce  $\text{Cu}^{2+}$  na uvedené jílové minerály se řídí rovnicí druhého řádu. Sorpční izotermy získané pomocí bezproudové sorpce na elektrodě neposkytly jednoznačný průběh. Byl prokázán významný vliv přítomnosti sodných a chloridových iontů na sorpci  $\text{Cu}^{2+}$ .

Koncentrační závislosti sorpce měřené voltametriky nemají jednoznačný průběh, tato metoda se jeví jako vhodnější ke studiu kinetiky sorpce. Naopak, klasická vsádková metoda je vhodnější pro získání sorpčních izoterem.

Tato práce vznikla s podporou projektu GA ČR 205/05/0871.

[1] Navrátilová Z., Kula P.: Cation and Anion Exchange on Clay Modified Electrodes. *J. Solid State Electrochem.* 4, 342 (2000).

[2] Kalusová M. : Bakalářská práce. Ostravská univerzita v Ostravě, Ostrava 2007.

[3] Hranická Z.: Bakalářská práce. Ostravská univerzita v Ostravě, Ostrava 2007.

## 1Po-Po7

## CHARAKTERISTIKA A VLASTNOSTI MONTMORILLONITU MODIFIKOVANÉHO ALKYLAMONIOVÝMI KATIONTY

V. ŠUGÁRKOVÁ<sup>1</sup>, Z. NAVRÁTILOVÁ<sup>1</sup>, P. WOJTOWICZ<sup>2</sup>, L. VACULÍKOVÁ<sup>1</sup>, E. PLEVOVÁ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústav geoniky AV ČR, v.v.i.

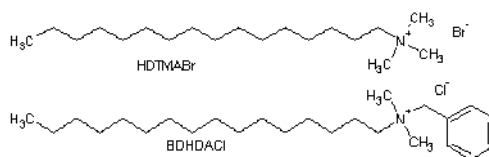
<sup>2</sup>Ostravská Univerzita v Ostravě

Korešpondenční autor: sugarkova@ugn.cas.cz

Byla provedena sorpce dvou rozdílných typů alkylamoniových solí (hexadecyltrimethylamonium bromidu - HDTMA a benzyldimethylhexadecylamonium chloridu - BDHDA) (viz obr) na dva rozdílné typy montmorillonitu [1]. První byl typ Wyoming (naleziště Crook County, USA, velikost částic pod  $10 \mu\text{m}$ ). Druhý typ byl z oblasti Jelšového potoka (Slovensko) s velikostí částic pod  $1 \mu\text{m}$ . Při přípravě byl studován vliv doby sorpce použitého alkylamoniového kationtu. Vzorky s nasorbovanými alkylamoniovými kationty byly charakterizovány pomocí infračervené spektroskopie, rentgenové difrakce a termické analýzy. Byla potvrzena sorpce obou alkylamoniových kationtů na oba typy montmorillonitu. Výsledky potvrdily, že pokud kvarterní amoniová sůl obsahuje aromatický kruh, bude sorbována ve větším množství. Důvodem je vznik dalších interakcí, zejména  $\pi$ - $\pi$  interakcí sousedních benzenových jader a indukovaných interakcí mezi benzenovým jádrem a povrchem jílové vrstvy. Studium sorpce  $\text{Cu}^{2+}$  na montmorillonity modifikované HDTMA a BDHDA poskytlo následující výsledky - BDHDA-Jp-MMT 0,51 mol.kg<sup>-1</sup>, HDTMA-Jp-MMT 0,83 mol.kg<sup>-1</sup>, BDHDA-SWy-MMT 0,99 mol.kg<sup>-1</sup>, HDTMA-SWy-MMT 0,34 mol.kg<sup>-1</sup>. Srovnáním s celkovou výměnnou kapacitou nemodifikovaných montmorillonitů - Jp-MMT 0,457 mol.kg<sup>-1</sup>, SWy-MMT 0,757 mol.kg<sup>-1</sup> - nelze nalézt jednoznačný trend. Podle naměřených údajů není nasorbované množství měďnatých iontů determinováno ani typem MMT použitého pro modifikaci, ani samotným alkylamoniovým kationtem.

Tato práce vznikla s podporou projektu GA ČR 205/05/0871.

[1] Wojtowicz P.:Bakalářská práce. Ostravská Univerzita v Ostravě, Ostrava 2007.



Použité alkylamoniové soli

**1Po-Po8****EFFECT OF METAL IONS ( $\text{Li}^+$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Ni}^{2+}$ ,  $\text{Cu}^{2+}$  AND  $\text{Zn}^{2+}$ ) AND WATER COORDINATION ON THE STRUCTURE OF GLYCINE AND ZWITTERIONIC GLYCINE**M. REMKO<sup>1</sup>, B.M. RODE<sup>2</sup><sup>1</sup>Univerzita Komenského, Farmaceutická fakulta, Katedra farmaceutickej chémie<sup>2</sup>Institute of General, Inorganic and Theoretical Chemistry, University of Innsbruck, Innrain 52a, A-6020 Innsbruck

Korešpondenčný autor: remko@pharm.uniba.sk

Interactions between metal ions and amino acids are common both in solution and in the gas phase. Here, the effect of metal ions and water on the structure of glycine is examined [1]. The effect of metal ions ( $\text{Li}^+$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Ni}^{2+}$ ,  $\text{Cu}^{2+}$  and  $\text{Zn}^{2+}$ ) and water on structures of  $\text{Gly.M}^{n+}(\text{H}_2\text{O})_m$ , and  $\text{GlyZwitt}\cdot\text{M}^{n+}(\text{H}_2\text{O})_m$ , ( $m=0, 2, 5$ ) complexes have been determined theoretically employing the hybrid B3LYP exchange-correlation functional and using extended basis sets. Selected calculations were carried out also by means of CBS-QB3 model chemistry. The computed Gibbs energies  $\Delta G^\circ$  are negative and span a rather broad energy interval (from -90 to -1100  $\text{kJ mol}^{-1}$ ) meaning that the ions studied form strong complexes. Our model calculations of the molecular structure and relative stability of the  $\text{Gly.M}^{n+}(\text{H}_2\text{O})_m$  and  $\text{GlyZwitt.M}^{n+}(\text{H}_2\text{O})_m$  ( $M^{n+} = \text{Li}^+$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Ni}^{2+}$ ,  $\text{Cu}^{2+}$  and  $\text{Zn}^{2+}$ ,  $m = 0, 2$  and  $5$ ) systems indicate that in the complexes with monovalent metal cations the most stable species are the NO coordinated metal cations in nonzwitterionic glycine. Divalent cations  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Ni}^{2+}$ ,  $\text{Cu}^{2+}$  and  $\text{Zn}^{2+}$  prefer coordination via the OO bifurcated bonds of the zwitterionic glycine. Addition of two water molecules at the metal ion in both  $\text{Gly.M}^{n+}$  and  $\text{GlyZwitt.M}^{n+}$  complexes reduces the relative stability of metallic complexes of glycine. For  $M^{n+} = \text{Li}^+$ ,  $\text{Na}^+$  the addition of five water molecules does not change the relative order of stability. In the  $\text{Gly}\cdot\text{K}^+$  complex the solvation shell of water molecules around  $\text{K}^+$  ion has, due to the larger size of the potassium cation, a different structure with a reduced number of hydrogen-bonded contacts. This results in a net preference (by 10.3  $\text{kJ mol}^{-1}$ ) of the  $\text{GlyZwitt}\cdot\text{K}^+(\text{H}_2\text{O})_5$  system. Addition of five water molecules to the glycine complexes containing divalent cations  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Ni}^{2+}$ ,  $\text{Cu}^{2+}$  and  $\text{Zn}^{2+}$  results in a net preference for nonzwitterionic glycine species.

The work has been supported by Slovak Grant Agency VEGA contract No 1/4301/07 (M.R.) and by the Austrian Federal Ministry for Science and Research.

[1] M. Remko, B. M. Rode, J. Phys. Chem. A 110 (2006) 1960-1967.

**1Po-Po9****STANOVENÍ AROMATICITY HUMINOVÝCH KYSELIN POMOCÍ LS 13C NMR SPEKTROSKOPIE**F. NOVÁK<sup>1</sup>, R. HRABAL<sup>2</sup>, O. KOUKOL<sup>3</sup>, I. BARTOŠOVÁ<sup>2</sup><sup>1</sup>Biologické centrum AV ČR, v. v. i.<sup>2</sup>NMR laboratory, ICT Praha, Technická 1905, 166 28 Praha 6<sup>3</sup>Institute of Botany, AS CR, v. v. i., 252 43 Průhonice

Korešpondenčný autor: novakf@dale.usbe.cas.cz

U osmi vzorků huminových kyselin (HK) a dvou fulvokyselín (FK) byla v roztoku NaOD (liquid state, LS) na spektrometru Bruker Avance DRX 500 změřena kvantitativní <sup>13</sup>C NMR spektra. Hlavním získaným strukturním údajem je aromaticita fa, vyjádřená jako podíl aromatických atomů C (oblast spektra 110 - 160 ppm) ke všem atomům C s výjimkou karboxylových a karbonylových (0 - 160 ppm). Aromaticita HK se pohybovala v rozmezí 23,7 - 67,7 %, nejnižší byla zjištěna u HK ze svrchního horizontu podzolu, u ostatních půd s výjimkou černozemě (67,7 %) byla v rozmezí 33 - 47 %. Vysoká aromaticita 60 - 65 % HK izolovaných z oxihumolitů se blíží hodnotě uváděné pro HK z Leonarditu (75 %) [1]. Aromaticita fulvokyselin (43 %) odpovídá středu intervalu pro HK. Ze studia <sup>13</sup>C NMR spekter FK a HK jsou zřejmé odlišnosti v jejich stavbě, dané především vyšším obsahem karboxylových a karbonylových atomů C u FK. Byl rovněž prokázán značný podíl alifatických (sacharidických i alkylových) atomů C v půdních huminových kyselinách, což může pomoci překonat rozšířené mínění, že chemická struktura těchto HK je převážně aromatická. Získané výsledky budou použity při testování stability HK a FK pomocí termické analýzy i při studiu biologického rozkladu těchto látek.

Příspěvek byl vypracován v rámci projektu GA ČR č. 206/05/0269

[1] Mao J. D., et. al., 2000. Soil Science Soc Amer J 64: 873.

**1Po-Po10****ODHADOVÉ METODY PRO URČENÍ NĚKTERÝCH CHARAKTERISTIK ORGANICKÝCH LÁTEK NA ZÁKLADĚ ZNALOSTI JEJICH STRUKTURY**Z. KOLSKÁ<sup>1</sup>, K. KUČA<sup>2</sup>, D. JUN<sup>2</sup>, M. KARLÍK<sup>3</sup><sup>1</sup>Univerzita J. E. Purkyně v Ústí nad Labem, Přírodovědecká fakulta, Katedra chemie<sup>2</sup>Centrum Pokročilých Studií, Fakulta vojenského zdravotnictví v Hradci Králové, Univerzita obrany v Brně<sup>3</sup>Ústav fyziky a měřicí techniky, VŠCHT Praha

Korešpondenčný autor: kolska@sci.ujep.cz



Většina fyzikálně chemických či toxikologicky významných parametrů látek je zjišťována experimentálně. Tyto metody jsou vždy vázány na vhodné technické vybavení, na čistotu a množství měřených látek a tím jsou často velmi časově a zejména finančně náročné. Zejména u toxikologicky významných charakteristik je často nedílnou součástí popisu látky experiment založený na přítomnosti živé testovací složky. Proto se v posledních letech hledají postupy, pomocí kterých bychom tyto parametry získali jinak než experimentálním stanovením. Jednou z možností jsou výpočetní nebo odhadové metody.

Naše pracoviště se již řadu let zabývá vývojem odhadových metod pro stanovení některých fyzikálně chemických vlastností čistých organických látek, jako jsou např. výparné entalpie, výparné entropie [1] či tepelné kapacity čistých kapalin a to jak při jedné významné teplotě, např. 298,15 K nebo normální teplotě varu, tak i v teplotním rozsahu.

Z důvodu stále se rozvíjející legislativy spojené s nakládáním s nebezpečnými chemickými látkami a nebezpečnými chemickými přípravky (dále jen NCHLP) a s tím související přípravou tzv. bezpečnostních listů vzrůstají nároky na znalost takových hodnot látek, které musí být pro každou NCHLP uvedeny. Proto se v poslední době zabýváme také vývojem neexperimentálních metod pro stanovení např. teploty vzplanutí čistých organických látek.

S informacemi uvedenými výše také souvisí rozvoj metod pro odhad hodnot biologické aktivity reaktivátorů acetylcholinesterázy inhibované pesticidy nebo případně nervově paralytickými látkami (NPL). Pesticidy jsou látky běžně dostupné, hojně užívané a přitom s účinkem na živé organismy podobným vlivu NPL na bázi organofosforových sloučenin. Zejména s neexperimentálním stanovením této veličiny se zabývají některá pracoviště [2].

Všechny výše uvedené odhadové metody mají společný základ. Jsou založeny na znalostech chemických struktur relevantních látek. Tím se stávají jednoduchými a univerzálně použitými.

*Tento úkol je zpracováván za podpory grantu č. IAA 400720710 Grantové Agentury AV ČR a grantu Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR č. MSMT 6046137306.*

[1] Kolská, Z.; Růžička, V.; Gani, R. Estimation of enthalpy of vaporization and of entropy of vaporization for pure organic compounds at 298.15 K and at normal boiling temperature by a group contribution method. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2005, 44, 8436-8454.

[2] Dohnal, V.; Kuča, K.; Jun, D. Prediction of a new broad-spectrum reactivator capable of reactivating acetylcholinesterase inhibited by nerve agents. *J.*

*Appl. Biomed.* 2005, 3, 139-145.

### IPo-Po11

## VLIV pH NA ADSORPCI TĚŽKÝCH KOVŮ NA UHLÍKATÝCH MATERIÁLECH

R. MARŠÁLEK, V. SLOVÁK, L. KUZNĚCOVOVÁ, L. RUPPENTALOVÁ

*Ostravská univerzita v Ostravě, Přírodovědecká fakulta, Katedra chemie*

Korespondenční autor: [roman.marsalek@osu.cz](mailto:roman.marsalek@osu.cz)

Řada faktorů má vliv na adsorpci těžkých kovů z roztoků. Jedním ze zásadních je hodnota pH roztoku (disperze). Hodnota pH ovlivňuje jednak formu kovového iontu a jednak samotný adsorbent (hodnotu jeho povrchového náboje resp. hodnotu zeta potenciálu). Jako adsorpční materiál bylo použito oxidačně alterované uhlí, jako adsorbát pak ionty olova a kadmia. Adsorpční isothermy byly linearizovány podle Langmuirovy adsorpční teorie a byly vypočteny adsorpční maxima. Dále byl proměřen zeta potenciál daného vzorku uhlí, jeho závislost na pH.

Větší afinitu k adsorpci na oxidačně alterovaném uhlí vykazují ionty olova, což je možné vysvětlit menší hydratací jejich iontů při daném pH. Pokud porovnáme adsorpční kapacity pro dané ionty ( $Pb^{II}$  a  $Cd^{II}$ ) dojdeme k závěru, že se snižujícím se pH klesá adsorpční kapacita uhlí.

Obecně lze říct, že takové chování je způsobeno posunem disociační rovnováhy kyselých (karboxylových) skupin na uhlíkovém povrchu během úpravy pH.

Oxidačně alterované uhlí se vlivem přítomných karboxylových skupin chová ve vodě jako slabá kyselina, disociuje. Právě tyto disociované skupiny vystupují jako adsorpční místa a podílejí se spolu s iontovýměnnými reakcemi na celkové adsorpční kapacitě. Ve stavu rovnováhy platí:

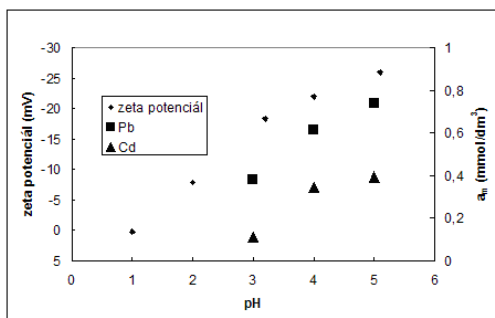
$$K_{HA} = \frac{c_{H^+} \cdot c_{A^-}}{c_{HA}}$$

Při úpravě pH během adsorpčního sledování, přidávkem HCl ( $H^+$ ) stoupne  $c_{H^+}$ , aby byla zachována rovnováha  $K_{HA}$  musí proběhnout reakce  $A^- + H^+ \rightarrow HA$ . Tímto krokem dojde k obsazení disociovaných skupin a tím také ke snížení adsorpční kapacity. Tato úprava se také odráží ve změně povrchového náboje a tím také ve změně zeta potenciálu. Klesající pH vede k nárůstu zeta potenciálu, záporný náboj se snižuje, případně dosáhne nuly (isoelektrický bod).

*Tato práce vznikla za podpory Ministerstva průmyslu a obchodu (2A-TP1/083) a Grantové agentury ČR (105/07/P041).*

[1] 1. Chen, J. P., Lin, M.: *Carbon* 39, 1491 (2001).  
2. Burns, C. A., Boily, J. P., Crawford, R. J., Harding, I. H.: *J Colloid Interf Sci* 278, 291 (2004).

3. Murakami, K., Ozaki, J., Nishiyaama, Y.: Fuel Process technol 43, 95 (1995).
4. Pehlivan, E., Richardson, A., Zuman, P.: Elektroanal 16, 1292 (2004).
5. Cho, H., Oh, D., Kim, K.: J Hazard Mat B 127, 187 (2005).
6. Eligwe, C., A., Okulue, N., B.: Fuel 73, 569 (1994).
7. Kuhr, J.H., Robertson, J.D., Lafferty, C.J., Wong, A.S., Stalnaker, N.D.: Energ Fuel 11, 323 (1998).
8. Zeledón-Torula, Z., Lao-Lugue, C., Solé-Sardans, M.: J Chem Technol Biot 80, 649 (2005).
9. Cox, M., El-Shafey, E., Pichugin, A.A., Appleton, Q.: J Chem Technol Biot 75, 427 (2000).
10. Tiwari, D.P., Singh, D.K., Saksena, D.N.: J Environ Eng 121, (1995).
11. Qadeer, R., Hanif, J.: Carbon 33, 215 (1995).
12. Karabulut, S., Karabakan, A., Denizli, A., Yurum, Y.: Sep Sci Technology 36, 3657 (2001).
13. Meena, A. K., Mishra, G.K., Kumar, S., Rajagopal, Ch.: Defence Sci J 54, 537 (2004).



Se snižujícím se pH klesá záporná hodnota zeta potenciálu a úměrně také adsorpční kapacity jednotlivých systémů.

### 1Po-Po12

#### POVRCHEM ZESÍLENÁ RAMANOVA SPEKTROSKOPIE 1-METHYLADENINU ZA VYUŽITÍ NANOČÁSTIC STŘÍBRA

R. PRUCEK<sup>1</sup>, L. KVÍTEK<sup>2</sup>, A. PANÁČEK<sup>1</sup>, J. SOUKUPOVÁ<sup>1</sup>, R. NOVOTNÝ<sup>3</sup>, D. KOUKALOVÁ<sup>4</sup>, V. MAŠEK<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta, Katedra fyzikální chemie

<sup>2</sup>Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta

<sup>3</sup>Univerzita Palackého v Olomouci, Lékařská fakulta, Pracoviště mikroskopických metod

<sup>4</sup>Univerzita Palackého v Olomouci, Lékařská Fakulta, Ústav mikrobiologie

<sup>5</sup>Univerzita Palackého v Olomouci, Lékařská fakulta, Ústav farmakologie

Korešpondenčný autor: robert.prucek@upol.cz

Fleischmannův objev povrchem zesílené Ramanovy spektroskopie (SERS) v roce 1974 na stříbrné elektrodě a zejména jeho znovuobjevení na koloidních částicích stříbra v roce 1977 Creightonem znamenal vznik nové výzkumné a analytické metody. SERS je používán ke studiu adsorpce a konformace jak jednoduchých organických molekul adsorbovaných na povrchu částic stříbra (např. 1,10-fenanthrolinu, 1,4-dihydrazinoftalazinu, mastných kyselin, dithiodipyridinů, thyminu, nukleových bazí), tak i pro studium složitějších biomolekul (např. cytochromu C, polypeptidů a proteinů).

Přes prvotní potíže s reprodukovatelností signálu, související s přípravou a aktivací částic stříbra, se SERS díky své specifčnosti, vysoké citlivosti a časové nenáročnosti dostává do oblasti zájmu praktické analýzy. Lze ji využít jako čistě detekční metodu např. v oblasti sekvenční analýzy DNA,[1] ale i pro kvantitativní stanovení pikomolárních množství průmyslově i biologicky významných sloučenin, např. metalloporfyrinů, léčiv, či xanthopterinu u pacientů s některými typy rakoviny.

Ke studiu efektu povrchového zesílení Ramanova signálu byly použity částice stříbra připravené redukcí amoniakálního komplexu stříbra xylosou. Průměrná velikost částic stříbra připravených uvedeným postupem byla přibližně 60 nm (stanoveno metodou DLS), což bylo v dobrém souladu s průměrnou velikostí určenou z TEM snímků (cca 55 nm). Jako testovaná látka byl použit 1-methyladenin. Ramanova spektra byla zaznamenána při laboratorní teplotě na spektrometru Jobin-Yvon T 64 000 s CCD detektorem chlazeným kapalným dusíkem. Porovnáním intenzit Ramanova spektra vodného roztoku 1-methyl adeninu o koncentraci  $10^{-2}$  mol.dm<sup>-3</sup> a diferenčního povrchem zesíleného Ramanova spektra 1-methyladeninu o koncentraci  $10^{-5}$  mol.dm<sup>-3</sup> v přítomnosti nanočástic stříbra a chloridu sodného o koncentraci 0,1 mol.dm<sup>-3</sup> vychází hodnota zesílení přibližně na  $10^5$ . [2]

Autoři děkují za finanční podporu grantu MSM6198959223

[1] N. R. Isola; D. L. Stokes; T. Vo-Dinh: Anal Chem 70, 1352-1356, (1998).

[2] L. Kvítek, R. Prucek, A. Panáček, R. Novotný, J. Hrbáč and R. Zbořil: J Mater Chem 15, 1099-1105, (2005).

**1Po-Po13****VYUŽITÍ BÓREM DOPOVANÉ DIAMANTOVÉ ELEKTRODY PRO VSÁDKOVÉ A PRŮTOKOVÉ ANALÝZY THIOLŮ KREVŇÍ PLASMY**K. PECKOVÁ<sup>1</sup>, B. HUŠÁKOVÁ<sup>2</sup>, R. ČABALA<sup>2</sup>, J. BAREK<sup>1</sup><sup>1</sup>Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Albertov 6, CZ 12843 Praha 2<sup>2</sup>Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, Albertov 2030, 128 43 Praha 2

Korešpondenční autor: kpeckova@natur.cuni.cz

Homocystein a glutathion patří mezi thiooly krevní plasmy s metabolismem spřízněným přes cystein. Bylo u nich prokázáno mnoho důležitých biologických funkcí. U tripeptidu glutathionu byly potvrzeny významné antioxidační a detoxikační vlastnosti související s ochranou buněk před oxidačním stresem a abiotickými vlivy (UV-zářením, různá xenobiotika, kyselé prostředí, anoxické podmínky, teplotní extrémy, atd.)<sup>1</sup>. Naproti tomu homocystein se hromadí v buňkách při poruchách metabolismu síry a jeho zvýšená hladina může souviset s ohrožením cévními a srdečními chorobami, únavovým syndromem, popřípadě Parkinsonovou a Alzheimerovou chorobou<sup>2</sup>.

Cílem této práce bylo charakterizovat elektrochemické chování homocysteinu (HS) a redukované (GSH) a oxidované (GSSH) formy glutathionu na bórem dopované diamantové filmové elektrodě (BDDFE). Při vsádkovém způsobu analýzy byly naměřeny cyklické voltamogramy GSH a GSSG v Brittonových-Robinsonových (BR) pufrách o pH 2-12, oxidace GSH se projevuje výrazným nárůstem proudu pro kladnější hodnoty než +0,4 V, tento trend je výraznější pro neutrální až zásadité prostředí. Pro GSSG je nárůst proudu proti základnímu elektrolytu poměrně nevýrazný. Pro stanovení GSH, GSSG a HC po jejich předchozí separaci na reverzní fázi na koloně Chromolith (100 x 4,6 mm, Merck) byly použity následně optimalizované podmínky: Mobilní fáze 0,1% kyselina trifluoroctová:acetonitril (98:2,v/v), potenciál detekce +1,2 V a průtoková rychlost 1,2 ml.min<sup>-1</sup>. Celková doba analýzy je 4,5 min, dosažené meze stanovitelnosti pro tenkovrstvý detektor s pracovní BDDFE jsou 1,5·10<sup>-5</sup> mol.l<sup>-1</sup> (HC); 3,3·10<sup>-6</sup> mol.l<sup>-1</sup> (GSH) a 7,3·10<sup>-6</sup> mol.l<sup>-1</sup> (GSSG).

K.P děkuje za finanční podporu Grantové agentury České republiky (Projekt 203/07/P261). Výzkum byl dále finančně podporován MŠMT ČR (projekt LC 06035 a MSM 0021620857).

[1] Pincemail J., Siquet J., Chapelle J. P., Cheramy-Bien J. P., Paulissen G., Chantillon A. M., Christiaens G., Gielen J., Limet R., Defraigne J. O.: Ann. Biol. Clin.-Paris 58, 177 (2000).

[2] Harpel P. C.: Fibrinolysis Proteolysis 77, 11 (1997).

**1Po-Po14****SEPARATION OF LONG LIVED RADIONUCLIDES FROM ENVIRONMENTAL SAMPLES AND RADIOACTIVE WASTE - OVERVIEW**

M. GALAMBOŠ, J. KUFCÁKOVÁ, P. RAJEC

Comenius University in Bratislava, Faculty of Natural Sciences, Department of Nuclear Chemistry

Korešpondenční autor: galambos@fns.uniba.sk

The article features an overview of the separation methods of long lived radionuclides from samples of the environment and radioactive waste currently used in the radio-analytical practice. Many of these methods are a subject to the research activities of Department of nuclear chemistry, whose aim is to classify complexly current status quo, morphology and speciation of pollutants as well as radiation influence on heterogeneous systems significant from the ecological and theoretical point of view. It also includes progressive methods of separation of long lived radionuclides with stress on minimalization of ecotoxicity.

The field of separation of long lived radionuclides currently avails of numerous separation methods and techniques (tab. 1).

The classical radio - chemical methods of separation and isolation of radionuclides based on crystallization, precipitation and sorption very often take too much time and during separation of trace concentrations of radionuclides unwanted occurrences of adsorption and precipitation take place. During separation processes of radionuclides it is necessary to chose an appropriate sequence according to individual physical and chemical as well as radiochemical features of the system components.

Recently an increasing attention has been paid to the so called rapid radiochemical methods of separation of long lived radionuclides [1].

The products for rapid analysis combine high selectivity of supramolecular receptors such as makrocyclic organic compounds from the group of cavitants with the advantages of membrane separation techniques [2]. A relatively new and attractive field of research of the „green chemists“ seems to be so called ionic liquids which are accompanied by development of new promising methods possibly useful for radionuclide separation [3].

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-20-007105.

[1] KOPUNEC R., MACÁŠEK F., MIKULAJ V. ET AL. : Ekspresnyi metod opredeleniya strontsiya-90 v rastvorakh vyderzannykh produktov deleniya. Radiokhimiya. 23: 314 - 318 (1981)

[2] RAJEC P., ŠVEC A., MIKULAJ V. ET AL.: Co-precipitation of 15-crown-5-ether complexes of lead

strontium with tungstosilicic acid. J. Radioanal. Nucl. Chem. 229(1): 9 - 12 (1998)

- [3] ZHAO H., XIA S., MA P.: Review Use of ionic liquids as „green“ solvents for extractions. J. Chem. Technol. Biotechnol. 80: 1089 - 1096 (2005)



Review of separation methods of radioactive elements

### 1Po-Po15

## VLASTNOSTI SEMIFLEXIBILNÉHO POLYMÉRNEHO REŤAZCA V SFÉRICKEJ DUTINE

Z. BENKOVÁ, P. CIFRA, T. BLEHA

Ústav polymérov, Slovenská Akadémia Vied, Dúbravská cesta, SK-84236 Bratislava, Slovenská republika

Korešpondenčný autor: [upolzb@savba.sk](mailto:upolzb@savba.sk)

Problematika polymérnych reťazcov v obmedzených priestoroch sa v poslednom období stala veľmi populárnou vďaka jej dôležitej úlohe v množstve biologických procesov a pokroku v experimentálnej technike umožňujúcej sledovať procesy na úrovni jednoduchých reťazcov. Ako príklad obmedzených biologických systémov možno uviesť zbalenie DNA vo vírusoch [1] alebo organizovanie a segregovanie chromozómov v baktériách. Väčšina biologických makromolekúl sa z hľadiska tuhosti zaraďuje ku semiflexibilným reťazcom. Teoretický model zaoberajúci sa problematikou zbalených tuhých reťazcov v dutinách s rôznou geometriou v súčasnosti nie je jednoznačne akceptovaný v dôsledku jeho komplikovanosti. Pri budovaní takejto teórie zohráva dôležitú úlohu prístup simulácií reťazcov v obmedzených priestoroch [2,3]. Táto práca je zameraná na modelovanie semiflexibilných reťazcov s rôznou tuhosťou zbalených v sférickej dutine. Sústreďujeme sa predovšetkým na to, ako obmedzenie ovplyvní konformáciu reťazca. Sledujeme zmeny vo vzdialenosti koncov reťazca, gyračnom polomere, perzistenčnej dĺžke reťazca (charakterizujúcej jeho tuhosť) v závislosti od

veľkosti dutiny ako aj od tuhosti reťazca. Kľúčovým je tu reťazec s tuhosťou zodpovedajúcou tuhosťou DNA. Dôležité informácie o usporiadaní reťazca v dutine poskytuje aj štruktúrny faktor ľahko dostupný z experimentálnych meraní aj simulačných výpočtov. Na základe Monte Carlo výpočtov sme získali obraz o orientácii semiflexibilného reťazca v sférickej dutine. Predovšetkým tuhšie makromolekuly prejavujú tendenciu navíjať sa vo vnútri dutiny do klobka, pričom v snahe o zachovanie perzistenčnej dĺžky voľného reťazca ponechávajú vnútro dutiny prázdne. Pri flexibilných reťazcoch je celá dutina vyplnená kompaktno. Výsledky z tejto práce sa použijú pri štúdiu vypudzovania polymérnych reťazcov z dutiny, čo v prírode predstavuje napr. mechanizmus vírusovej infekcie [1].

Táto práca bola finančne podporená grantom VEGA 2/6116/26 and a čiastočne centrom COMCHEM.

- [1] I. Ali, D. Marenduzzo, J. M. Yeomans Phys. Rev. Lett., 96, 208102 (2006).  
 [2] P. Cifra Macromolecules, 38, 3989 (2005).  
 [3] P. Cifra J. Chem. Phys., 124, 024706 (2006).

### 1Po-Po16

## EXTRAKCE MĚDNATÝCH IONTŮ Z GELU HUMINOVÝCH KYSELIN

P. SEDLÁČEK<sup>1</sup>, L. KRPAŤOVÁ<sup>2</sup>, M. KLUČÁKOVÁ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav fyzikální a spotřební chemie

<sup>2</sup>Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická

Korešpondenčný autor: [sedlacek-p@fch.vutbr.cz](mailto:sedlacek-p@fch.vutbr.cz)

Humínové kyseliny predstavujú složitý prírodný materiál, ktorý svojí vysokou sorpčnou schopnosťou výrazne prispívajú k samočisteniu pôd a sedimentů a nabíjajú sa ako nadšný substrát k priemyselnej produkcii detoxifikačných a remediačných prostriedků. Celá rada autorů sa venuje štúdiu sorpcie a imobilizácie bežných organických i anorganických polutantů na pevné alebo rozpuštené humínové látky. Poslední práce v této oblasti prezentují humínový gel jako vhodné médium pro modelování transportu a imobilizácie iontů těžkých kovů v přirozeně se vyskytujících humínových systémech [1-3]. Základní podmínkou pro správnou interpretaci výsledků difúzních experimentů je vhodný výběr činidel pro extrakci volných nebo chemicky poutaných iontů z humínového gelu. Tento příspěvek je zaměřen na srovnání účinnosti extrakce měďnatých iontů z humínového gelu různými chemickými látkami. První část se věnuje výběru činidla pro úplnou extrakci veškeré nadšfundované a navázané měďi; z vybraných činidel byla stoprocentní účinnost extrakce prokázána pouze při použití amonné soli EDTA.

Ve druhej časti bola sledovaná účinnosť extrakcie pro-  
čínidla rôznej sily, odpovedajúcej rôznej sily väzby mied-  
natých iónov v gely. Chemická podstata väzby iónov na  
humínové látky a jej poruchy během extrakcie je ověřena  
srovnáním IR spekter vysušených gelů před a po extrakci.

Tato práce vznikla s podporou projektu MSM 0021630501.

- [1] Klučáková, M.; Sedláček, P. Possibilities of mod-  
elling of metal ions transport in nature. In The Sev-  
enth European Meeting on Environmental Chem-  
istry EMEC7. Brno, Brno University of Technology.  
2006. p. 104 - 104. ISBN 80-214-3320-5.
- [2] Sedláček, P.; Klučáková, M. Function of humic  
acids in heavy metal transport in nature. In 11th  
Conference on Environment and Mineral Process-  
ing. Part II. Ostrava, VŠB-TU Ostrava. 2007. p.  
265 - 270. ISBN 978-80-248-1278-6.
- [3] Klučáková, M.; Pekař, M. Diffusion of Metal  
Cations in Humic Gels. In Humic Substances:  
Nature's Most Versatile Materials (Ghabbour E.A.,  
Davies G., eds.), p. 263-74, Taylor & Francis, NY  
2004

### 1Po-Po17

#### INTERFACIAL TENSION BETWEEN ALUMINUM AND CRYOLITE MELTS DURING ELECTROLYSIS OF THE SYSTEMS $\text{Na}_3\text{AlF}_6$ - $\text{AlF}_3$ (NaF) - $\text{Al}_2\text{O}_3$

M. KORENKO

Ústav anorganickej chémie SAV, Bratislava

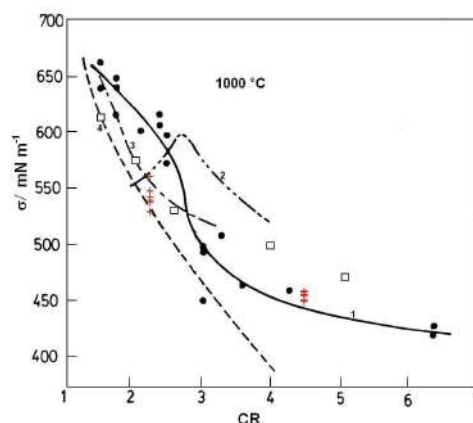
Korešpondenčný autor: uachmiko@savba.sk

The interfacial tension between aluminum and cryolite  
melts containing different salt additions has been mea-  
sured by the capillary depression method. The technique  
is based on the measurement of the capillary depression  
occurring when the capillary, which is moved vertically  
down through the molten salt layer, passes through the  
salt/metal interface. All technical details of that tech-  
niques can be found in [ 1 ]. The interfacial tension was  
found to be strongly dependent on the  $n(\text{NaF})/n(\text{AlF}_3)$  ra-  
tio (cryolite ratio, CR), (Fig 1). At the CR 2.28 (80 wt.%  
 $\text{Na}_3\text{AlF}_6$  + 10 wt.%  $\text{AlF}_3$  + 10 wt.%  $\text{Al}_2\text{O}_3$  // Al,  $t =$   
1000 °C) the interfacial tension was  $546 \text{ mN m}^{-1}$ , while  
it was  $450 \text{ mN m}^{-1}$  the CR 4.43 (80 wt.%  $\text{Na}_3\text{AlF}_6$  + 10  
wt.% NaF + 10 wt.%  $\text{Al}_2\text{O}_3$  // Al,  $t = 1000$  °C). Experi-  
ments under current flow conditions were also performed.  
During the electrolysis the interfacial tension at CR 2.28  
decreased from  $546 \text{ mN m}^{-1}$  at zero current to  $518 \text{ mN}$   
 $\text{m}^{-1}$  at  $0.112 \text{ A cm}^{-2}$  (Fig. 2). The same trend was ob-  
served in the system with CR 4.43. The interfacial ten-  
sion decreased from  $450 \text{ mN m}^{-1}$  at zero current to  $400$

$\text{mN m}^{-1}$  at  $0.112 \text{ A cm}^{-2}$ . The consequent increase in in-  
terfacial tension of these systems caused by interruption  
of electrolysis was observed (Fig. 3). Electrolysis of the  
system 25 wt.% NaF + 75 wt.% NaCl (eutectic mixture) /  
Al indicated no influence of applied current on the in-  
terfacial tension at  $850$  °C .

This work was supported by the Science and Technology Assistance  
Agency under contract No. APVV -51-008104 and by Slovak Grant  
Agency VEGA 2/4071/04.

- 1 A. Silný, T. A. Utigard, J. Chem. Eng. Data 41,  
(1996) 1061.
- 2 T. Utigard and J.M. Toguri, Metallurgical Transac-  
tions B, vol. 16B, (1985)
- 3 Zhanguo Fan and T. Østvold, Aluminium 67, (1991)  
287.



Interfacial tension of aluminum in cryolite melts as a  
function of CR. 1- Utigard Toguri [2], 2- Zhemchuzhina  
and Belyaev [2], 3- Gerasimov and Belyaev [2], Dewing  
and Desclaux [2], □- Zhanguo Fan and Østvold [3], + -  
present study

### 1Po-Po18

#### UHLÍKOVÉ NANORÚRKY A ICH VYUŽITIE PRE ELEKTROCHEMICKÚ DETEKCIU

S. ŠTEFÁNOVÁ, L. PIKNA

Katedra chémie, Humická fakulta TU Košice, Letná 9, 042 00 Košice

Korešpondenčný autor: silvia.stefanova@tuke.sk

Uhlíkové nanorúrky (CNT z angl. carbon nan-  
otubes) sú fullerénu blízke štruktúry, ktoré pozostávajú  
z grafénových valcov uzavretých na oboch koncoch  
uzáverom obsahujúcim päťuholníkové kruhy. Sú to

makromolekuly uhlíka, ktoré vznikajú zrolovaním grafitových vrstiev do valca. Objavené boli začiatkom deväťdesiatych rokov v Japonsku. Majú 100 násobne lepšiu pevnosť v ťahu ako oceľ, lepšiu tepelnú vodivosť ako diamant a elektrickú vodivosť podobnú medi, no so schopnosťou viesť oveľa väčšie prúdy. Na základe spôsobu zvinutia rozlišujeme tri typy uhlíkových nanorúrok: „zig-zag“, „armchair“ a chirálne. V súčasnosti sa uhlíkové nanorúrky vyrábajú ako jednovrstvové (SWCNT) alebo viacvrstvové (MWCNT) tvorené sústrednými rúrkami. Uhlíkové nanorúrky sa syntetizujú väčšinou tromi základnými technikami: metódou oblúkového výboja, metódou laserového ohniska a chemickou metódou vytvárania povlakov. Vďaka unikátnym elektrickým a mechanickým vlastnostiam nachádzajú uhlíkové nanorúrky široké uplatnenie, napr. pri výrobe veľmi pevných a zároveň ľahkých kompozitných materiálov, v elektronike pri výrobe mimoriadne malých tranzistorov. Využívajú sa tiež ako nanosenzory, FED displeje, zdroje žiarenia, ako materiály na uskladňovanie vodíka pre palivové články, polovodičové zariadenia veľkosti niekoľkých nanometrov, sondy, spojky atď. Svoje uplatnenie našli aj v elektroanalýze. Uhlíkové nanorúrky sa použili na modifikáciu rôznych elektródových povrchov, z ktorých bola zatiaľ najlepšie opísaná modifikácia povrchu elektródy zo sklovitého uhlíka (GC). Táto modifikovaná elektróda bola použitá napr. na zlepšenie stability a citlivosti voltamperometrických meraní fenolových zmesí [1], na stanovenie stopového xantínu anodickou stripping voltampérometriou [2] a iné. Uhlíkové pastové elektródy (CPE) modifikované viacvrstvovými uhlíkovými nanorúrkami sa získavajú zmiešaním uhlíkových nanorúrok s ropou. Použitie tohto typu elektródy pre elektrochemické merania ferikyanidu, katecholu, dopamínu alebo serotonínu, prinieslo výrazné zlepšenie v porovnaní s konvenčnou uhlíkovou pastovou elektródou. [3] Široké uplatnenie má aj elektróda zložená z uhlíkových nanorúrok a epoxidovej živice, ktorá bola použitá na snímanie biologického materiálu, enzýmov, protilátok alebo DNA. [3] Boli pripravené aj elektródy zložené z uhlíkových nanorúrok a teflónu, zmiešaním nanorúrok s granulovaným teflónom.

Príspevok vznikol s podporou GA SR VEGA č. 1/1108/04 a agentúry APVT- grant č. 20-009404

- [1] Wang J., Randhir P., Musameh M.: *Electroanalysis*, 15, 23-24,1830, 2003
- [2] Zhao G., Zang S., Liu K., Lin S., Liang J., Guo X., Zhang Z.: *Analytical letters*, 35, 14:2233, 2002
- [3] Merkoci A., Pumera M., Llopis X., Pérez, B., Valle, M., Alegret S.: *Trends in Analytical Chemistry*, 24, 9,826, 2005

## 1Po-Po19

### DENSITY AND MOLAR VOLUME OF THE MELTS $\text{MF-K}_2\text{NBF}_7$ ( $\text{MF} = \text{LiF-NaF, LiF-KF AND NaF-KF}$ )

M. BOCA

Ústav anorganickej chémie SAV, Bratislava

Korešpondenčný autor: uachboca@savba.sk

The density of the ternary system  $\text{NaF-KF-K}_2\text{NbF}_7$  (Figure 1) was measured by the Archimedean method. The molar volume, excess molar volume and partial molar volumes have been calculated at different temperatures. Mathematical descriptions of the concentration dependence of the density and molar volume have been generated. Obtained results have been compared with the respective quantities of the systems  $\text{LiF-KF-K}_2\text{NbF}_7$  and  $\text{LiF-NaF-K}_2\text{NbF}_7$ . Two opposite effects influencing the volume properties have been identified. On one side an association reaction of  $\text{F}^-$  and  $[\text{NbF}_7]^{2-}$  anions forming  $[\text{NbF}_8]^{3-}$  was considered resulting to the volume contraction. On other side the volume expansion was identified caused by the present alkaline cation.

Acknowledgements: Slovak Grant Agency (VEGA-2/6179/26) is acknowledged for financial support.

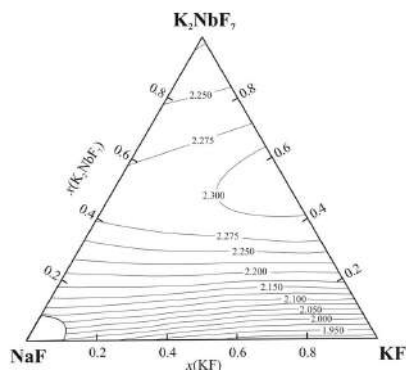


Figure 1: The density of the ternary system  $\text{NaF-KF-K}_2\text{NbF}_7$  at the temperature of 950 °C. Values are in  $\text{g cm}^{-3}$ .

## 1Po-Po20

### REACTION MECHANISM OF HEPATITIS DELTA VIRUS RIBORYME SELF-CLEAVAGE REACTION

P. BANÁŠ<sup>1</sup>, M. OTYEPKA<sup>2</sup>, L. RULÍŠEK<sup>3</sup>, D. SVOZIL<sup>3</sup>, J. ŠPONER<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Palackého Olomouc, Přírodovědecká fakulta, Katedra fyzikální chemie

<sup>2</sup>Department of Physical Chemistry and Center for Biomolecular and Complex Molecular Systems, Palacky University



<sup>3</sup>Department of Molecular Modeling, Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic

<sup>4</sup>Institute of Biophysics, Academy of Science of the Czech republic

Korešpondenčný autor: [ribicka.neonka@email.cz](mailto:ribicka.neonka@email.cz)

Hepatitis delta virus (HDV) is a satellite virus of the infectious human pathogen hepatitis B virus that can cause acute liver infection. HDV uses for its replication a small catalytic RNA molecule called hepatitis delta virus ribozyme (HDVr). HDVr catalyzes self-cleavage reaction of the multimeric genomic and antigenomic RNA strand arising in double-rolling mechanism of HDV genome replication. Although, the enormous effort was paid to solve the reaction mechanism of HDVr self-cleavage, many points remain unclear.

The HDVr is 85 nucleotides long single strand RNA forming a double-nested pseudoknot. Site-specific self-cleavage reaction requires a nucleophilic attack of base activated 2'OH of U-1 to the scissile G1 phosphate producing 5'-hydroxyl and 2',3'-cyclophosphate termini. The HDVr catalyzes this reaction at physiological concentration of divalent ions (e.g. 1-2 mM Mg<sup>2+</sup> or Ca<sup>2+</sup>); however, a residual activity was observed at high concentration of monovalent ions and low pH (e.g. 0.5-4 M LiCl and pH < 4).

The reaction mechanism remains still unknown mainly due to lack of experimental structural data. The self-cleaving reaction disallows to study the native structure of HDVr precursor and only X-ray structures of non-reactive C75U mutant are available. Unfortunately, the C75U point mutation significantly affects configuration of the HDVr active site as well as the position of divalent ions in X-ray structures. Two different mechanisms are proposed, where C75 acts as either general acid or general base. The molecular dynamic simulations and hybrid *ab initio* - molecular mechanic QM/MM calculations were used to uncover the reaction mechanism of HDV ribozyme in presence of Mg<sup>2+</sup> ions.

We acknowledge financial support from the Czech Ministry of Education, Youth and Sports (grants MSM6198959216, LC512).

## 1Po-Po21

### ACIDOBAZICKÉ CHOVÁNÍ OXIDAČNĚ ALTEROVANÉHO UHLÍ A SORPCE KOVŮ

V. SLOVÁK<sup>1</sup>, R. MARŠÁLEK<sup>1</sup>, L. KUZNĚCOVOVÁ<sup>1</sup>, L. RUPPENTALOVÁ<sup>1</sup>, M. JANÍČEK<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ostravská univerzita v Ostravě, Přírodovědecká fakulta, Katedra chemie

<sup>2</sup>Přírodovědecká fakulta Ostravské univerzity v Ostravě

Korešpondenčný autor: [vaclav.slovak@osu.cz](mailto:vaclav.slovak@osu.cz)

Byly sledovány změny pH suspenze uhlí ve vodě a roztocích HCl o koncentraci 10<sup>-2</sup> a 10<sup>-4</sup> mol dm<sup>-3</sup> (0,5g uhlí a 50 cm<sup>3</sup> roztoku) při laboratorní teplotě. Bylo zjištěno, že uhlí se do jisté míry chová jako směs slabé kyseliny a její soli - má vlastnosti pufru. Z experimentálních dat byla (zjednodušeným modelem) vypočtena konstanta acidity hypotetické „uhelné“ kyseliny 8,3 · 10<sup>-6</sup> (hodnota ležící mezi konstantami acidity fenolů a karboxylových kyselin) a její obsah v uhlí v disociované resp. nedisociované formě (1,23 resp. 0,02 mmol g<sup>-1</sup>). To ukazuje, že použité alterované uhlí je schopno (v daném poměru) téměř „zneutralizovat“ roztoky s pH = 2 - 3.

Analogické experimenty byly provedeny s roztoky obsahujícími Zn<sup>2+</sup>, Cd<sup>2+</sup> a Pb<sup>2+</sup> (dusičnany, 10 mmol dm<sup>-3</sup>), přičemž byla současně sledována i sorpce kovů na uhlí. Výsledky ukázaly, že v přítomnosti kovů je neutralizační kapacita uhlí snížena. Toto snížení je alespoň kvalitativně ve shodě se schopností uhlí kovy adsorbovat - nižší neutralizační kapacita byla zjištěna v roztocích Pb<sup>2+</sup> než v přítomnosti Zn<sup>2+</sup> a Cd<sup>2+</sup>. Z roztoků ve vodě se sorbovalo 0,566 mmol Pb<sup>2+</sup> na gram uhlí, pro zinek resp. kadmium byla adsorbovaná množství 0,411 resp. 0,394 mmol g<sup>-1</sup>.

Na druhou stranu, snížení počátečního pH suspenze vede k prakticky stejnému absolutnímu snížení adsorbovaného množství všech studovaných kovů (o 0,11 mmol g<sup>-1</sup> při sorpci z HCl o koncentraci 10<sup>-2</sup> mol dm<sup>-3</sup> vzhledem k destilované vodě).

Zdá se, že známá souvislost sorpce kovů na uhlí a pH není zcela jednoduchá a představuje pole pro detailní výzkum především v oblasti sorpcí bez „umělé“ úpravy pH, které jsou pro praktické použití uhlí jako sorbentu výhodnější.

Tato práce vznikla za podpory Ministerstva průmyslu a obchodu ČR (2A-ITP1/083).

## 1Po-Po22

### STANOVENÍ KINETICKÝCH KONSTANT NEINHIBOVANÝCH A INHIBOVANÝCH HYDROLÝZ ACETYLCHOLINU

Š. ŠTĚPÁNKOVÁ<sup>1</sup>, K. KOMERS<sup>2</sup>, A. KOMERSOVÁ<sup>2</sup>, A. ČEGAN<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Katedra biologických a biochemických věd

<sup>2</sup>Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Katedra fyzikální chemie

Korešpondenční autor: sarka.stepankova@upce.cz

Acetylcholin působí jako neuromediátor v cholinergním nervovém systému mozku. Je hydrolyzován dvěma typy cholinesteráz - acetylcholinesterázou a butyrylcholinesterázou. Snížené množství acetylcholinu, způsobené mimo jiné jeho nadměrným štěpením cholinesterázami, je považováno za jednu z příčin rozvoje Alzheimerovy choroby.

Standardní přístup při léčbě Alzheimerovy choroby představují tzv. inhibitory cholinesteráz. Působí zlepšení cholinergní transmise reverzibilní, pseudoreverzibilní nebo ireverzibilní inhibicí cholinesteráz, čímž brání nadměrnému odbourávání acetylcholinu v synaptické štěrbině a zvyšují tak jeho dostupnost pro cholinergní receptory.

Tato práce se zabývá stanovením kinetických parametrů neinhibovaných a inhibovaných hydrolyz acetylcholinu. Jako potenciální inhibitory byly testovány látky s karbamátovou skupinou. Ke stanovení byla použita tzv. pH-statová metoda [1], jejíž detailní popis je uveden v [2].

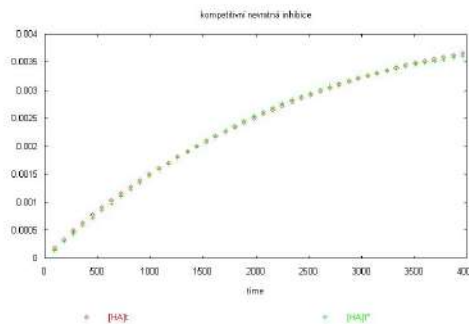
Z experimentálních dat byly získány závislosti koncentrace produktu enzymatické hydrolyzy na čase. U všech získaných závislostí koncentrace produktu vs. čas byla ověřována platnost rovnice Michaelis-Mentenové. V kladném případě byly získány hodnoty rychlostních konstant  $k_i$  a hodnoty  $K_M$  a  $V_m$ . U inhibovaných hydrolyz byla ještě ověřována platnost mechanismu kompetitivní nevratné inhibice. V kladném případě byla získána hodnota rychlostní konstanty popisující rychlost reakce enzymu s inhibitorem. Experimentální data byla vyhodnocena pomocí PC programu GEPASI [3].

Tato práce vznikla za finanční podpory Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR v rámci projektu MSM 0021627502.

[1] Hanin I., Dudas B.: Measurement of cholinesterase activity. V: Giacobini E. Cholinesterases and Cholinesterase Inhibitors, Dunitz LTD, London, 2000, 139-144.

[2] Zdražilová P., Štěpánková Š., Vránová M., Komers K., Komersová A., Čegan A.: Kinetics of total enzymatic hydrolysis of acetylcholine and acetylthiocholine. Z. Naturforsch, 61c, 2006, 289 - 294.

[3] <http://www.gepasi.org>



Obr. 1 Příklad splnění reakčního mechanismu kompetitivní nevratné inhibice. Experimentální ( $\diamond$ ) a teoretický ( $+$ ) průběh.

### IPo-Po23

#### LIGNIT A RADIKÁLOVÉ PROCESY

P. MAJZLÍK<sup>1</sup>, L. OMELKA<sup>1</sup>, M. PEKAŘ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav fyzikální a spotřební chemie

<sup>2</sup>Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická

Korešpondenční autor: majzlik@fch.vutbr.cz

Jihomoravský lignit nacházel a stále ještě nachází své hlavní uplatnění v energetice jako tuhé palivo. Díky svému nízkému stupni prouhelnění nepatří ke kvalitním palivům, především kvůli nízkým hodnotám základních parametrů jako jsou výhřevnost a spalné teplo, ale zůstává palivem levným a uspokojivým. Spalování lignitu tak představuje především plýtvání zajímavým materiálem, cennou surovinou pro různé neenergetické aplikace v ekologických a zemědělských technologiích. FCH VUT v Brně se již řadu let zabývá fyzikálně chemickými vlastnostmi jihomoravského lignitu a tento příspěvek je věnován radikálovým procesům probíhající na povrchu, případně v přítomnosti drčeného jihomoravského lignitu.[1] Byla sledována schopnost lignitu rozkládat peroxidické sloučeniny (peroxid vodíku, terc-butyldihydroperoxyd) a stabilita lignitu při ozařování UV/VIS. Rozklad peroxidických sloučenin byl sledován jak titračně tak i pomocí metody EPR spektroskopie za využití spin-trapping techniky. Byla potvrzena schopnost lignitu rozkládat tyto peroxidické sloučeniny. Koncentrace radikálů se v průběhu ozařování UV/VIS významně neměnila. Z těchto výsledků vyplývá, že lignit by mohl být potenciálně využit jako rozkladné činidlo různých sloučenin a dále jako látka, zabraňující degradaci polymerních materiálů účinkem UV/VIS.

Tato práce vznikla za finanční podpory grantové agentury České republiky, reg. č. 105/05/0404.

[1] Pekař M., Klučáková M., Omelka L., Zedníčková P. Cost-Effective Non-Fuel Applications of Lignite.



In Humic Substances - Linking Structure to Functions, Proceedings of the 13th Meeting of the International Humic Substances Society. F.H. Frimmel, G. Abbt-Braun, Eds., Schriftenreihe Bereich Wasserchemie Engler-Bunte-Institut der Universität Karlsruhe, 2006, vol. 45-II, pp. 1029-1032. ISSN 1612-118x.

### 1Po-Po24

#### STANOVENÍ AKTIVITY STEAROYL-COA-DESATURASY-1 (SCD 1)

M. ELCNEROVÁ<sup>1</sup>, A. ČEGAN<sup>2</sup>, K. KOMÁREK<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Pardubice

<sup>2</sup>Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Katedra biologických a biochemických věd

<sup>3</sup>Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Katedra analytické chemie

Korešpondenční autor: M.Elcnerova@seznam.cz

SCD-1 je enzym nezbytný pro biosyntézu nenasycených mastných kyselin z nasycených mastných kyselin, které jsou nepostradatelné pro syntézu esterů glycerolu a cholesterolu v lidském organismu. Tyto lipidy jsou hlavní součástí VLDL frakcelidské plazmy umožňující transport mastných kyselin z jater do tukových tkání a dalších orgánů. Měřítkem aktivity SCD-1 je poměr mezi kyselinou olejovou a kyselinou stearovou resp. poměr mezi kyselinou palmito-olejovou a kyselinou palmitovou v krevní plazmě.

Analyzovaný vzorek plazmy byl nejprve 16 hod. flotačně ultracentrifugován při 40000 rpm, VLDL byla oddělena od směsi LDL a HDL a následně deproteinována. Lipidové složky VLDL byly extrahovány a rozděleny preparativní chromatografií na tenké vrstvě do pěti tříd (fosfolipidy, diacylglyceroly, volné mastné kyseliny, triacylglyceroly a estery cholesterolu). Triacylglyceroly (TG) byly převedeny na methylestery včetně interního standardu cis-13,16,19-docosatrienové kyseliny ( $c = 5 \mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$ ), organická fáze byla odpipetována, odpařena pod dusíkem a analyzována pomocí GC s FID. K přiřazení píků 20 fyziologických mastných kyselin byly použity standardy ve vodném lidském albuminu, validace metodiky byla provedena s výše uvedeným vnitřním standardem.

Hodnoty aktivity SCD-1 v TG byly vícerozměrnou statistickou analýzou korelovány s fyziologickými nálezy pacientů a bylo zjištěno, že aktivita SCD-1 koreluje s poškozením jater a insulinovou rezistencí u obézních diabetiků. Aktivita SCD-1 může být proto využita jako nezávislý diagnostický marker insulin rezistentního diabetu typu 2.

### 1Po-Po25

#### STABILIZACE STRUKTURY PROTEINŮ A ROLE DISPERZNÍCH INTERAKCÍ

P. POLCR<sup>1</sup>, J. VONDRÁŠEK<sup>2</sup>, P. HOBZA<sup>2</sup>, P. JUREČKA<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci

<sup>2</sup>UOCHB, Flemingovo n. 2, 16610 Praha 6

<sup>3</sup>Univerzita Palackého Olomouc, Přírodovědecká fakulta, Katedra fyzikální chemie

Korešpondenční autor: pavel.polcr@seznam.cz

Co dnes víme o způsobu stabilizace struktury proteinů? Zatímco panuje shoda v tom, že struktura proteinů je stabilizována hlavně dvěma činiteli, takzvaným hydrofobním efektem a van der Waalsovými interakcemi, názory na důležitost obou příspěvků se liší. Velká část vědců se domnívá, že hydrofobní efekt je daleko nejdůležitější. V poslední době ale sílí názor, že úloha van der Waalsových sil je podceňována a může být ve skutečnosti rozhodující. Tady je důležité poznamenat, že většina našich dnešních znalostí o stabilitě proteinů pochází z experimentu.

Naším cílem bylo zkoumat problém z pohledu teorie, která umožňuje přímočaré oddělení obou výše zmíněných příspěvků. Byly určeny jak jednotlivé složky interakční energie postranních řetězců v molekule proteinu, tak i vliv hydratace při umístění proteinu do solventu. Byl uvažován proces sbalení proteinu.

Vypočítané výsledky byly porovnány s experimentálními daty. Experiment poměrně dobře koreluje s teoretickými výpočty, což není vždy zcela automatické. Jak již bylo řečeno, výpočty byly prováděny ve vodném prostředí, které se blíží prostředí fyziologickému. Ukázalo se, že při pokusu vyjádřit relativní důležitost jednotlivých příspěvků ke stabilizaci docházíme v obou případech (tedy se započtením vlivu solvatace a bez něho) k diametrálně odlišným výsledkům. Zahrnutí solvatace je tedy pro zjištění relativních příspěvků ke stabilizaci naprosto rozhodující. Z teoretických výpočtů poté vyplývá dominantní vliv hydrofobního efektu na stabilitu struktury proteinu.

Poděkování patří projektu Badatel a grantu STM-Morava (projekt MSMT č. 2E06029).

**1Po-Po26****NOVÉ MOŽNOSTI VYUŽITÍ TECHNIKY ADSORPTIVNÍHO PŘENOSU V ANALÝZE BIOLOGICKÝ VÝZNAMNÝCH SLOUČENIN**

J. BALOUN<sup>1</sup>, V. ADAM<sup>1</sup>, R. MIKELOVÁ<sup>2</sup>, L. TRNKOVÁ<sup>2</sup>, R. KIZEK<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Mendelova zemědělská a lesnická univerzita v Brně, Masarykova univerzita

<sup>2</sup>Masarykova univerzita

Korešpondenční autor: kizek@sci.muni.cz

Biologický význam thiolových sloučenin není doposud uspokojivě prozkoumán. Intenzivně se studuje jejich vztah k regulaci hladiny kyslíkových radikálů, iontů kovů atd. Metallothionein (MT) je nízkomolekulární na cystein velmi bohatý protein. Jeho hlavní biologickou funkcí v živočišných organismech je udržování homeostázy iontů kovů. Navíc se velmi diskutuje nadměrná exprese tohoto proteinu u pacientů se zhoubnými nádory. V časopise Analytical Chemistry bylo publikováno 11 prací zabývajících se stanovením metallothioneinu. Práce jsou zaměřeny na využití kapilární elektroforézy, kapalinové chromatografie, spektroskopie, imunotechniky a v neposlední řadě také elektrochemie. Cílem naší práce byla jednoduchá modifikace elektrochemické techniky adsorptivního přenosu pro analýzu nanolitrových množství vzorku MT. Byl analyzován MT (100  $\mu$ M) v kapce o rozličných objemech (od 500 nl do 15  $\mu$ l) pomocí diferenční pulsní voltametrie Brdičkovy reakce. Zjistili jsme, že se zmenšující se velikostí kapky dochází k nárůstu experimentální chyby měření, která souvisí pravděpodobně s rychlostí odpařování vody ze vzorku. Technicky je možné tuto výraznou obtíž vyřešit pomocí modifikace přenosové techniky. Povrch, ze kterého je vzorek adsorbován, je nejdříve ochlazen a poté je na něj nanesen analyzovaný vzorek o požadovaném objemu. Po akumulaci analytu na povrch pracovní visící rtuťové kapkové elektrody je elektroda omyta v destilované vodě a pufru a následně je provedena elektrochemická detekce. Podchlazení povrchu přináší pro analýzu vzorku několik výhod, především zpomalení vypařování z velmi malých objemů vzorku. Získané signály byly velmi dobře reprodukovatelné a chyba stanovení nepřesáhla 5 %. Navržená technická modifikace Palečkovy přenosové metody umožní další výrazný posun v detekci velmi malých množství biologicky významných sloučenin.

Práce na tomto projektu byla podporována granty GAAV IAAA40199071, ICHEMBIOL MSMT 0021622412.

- [1] R. Kizek, L. Trnkova and E. Palecek Determination of metallothionein at the femtomole level by constant current stripping chronopotentiometry, *Anal. Chem.* 73 (2001) 4801-4807.
- [2] E. Palecek and I. Postbieglova Adsorptive Stripping Voltammetry of Biomacromolecules with Transfer

of the Adsorbed Layer, *J. Electroanal. Chem.* 214 (1986) 359-371.

- [3] J. Petrlova, D. Potesil, R. Mikelova, O. Blastik, V. Adam, L. Trnkova, F. Jelen, R. Prusa, J. Kukacka and R. Kizek Attomole voltammetric determination of metallothionein, *Electrochim. Acta* 51 (2006) 5112-5119.

**1Po-Po27****CATECHOL-O-METHYLTRANSFERASE INHIBITORS**

M. PROKOPOWICZ, P. MŁYNNARZ, P. KAFARSKI

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

Korešpondenční autor: monika.prokopowicz@pwr.wroc.pl

Catechol-O-methyltransferase (COMT, EC 2.1.1.6) catalyses a transfer of the methyl group from the coenzyme S-adenosyl-L-methionine (SAM) to the one of the catechol hydroxyls. COMT has proved to play an important role in the metabolism of the biologically active catecholamines and neuroactive xenobiotics with catechol motif [1]. Routinely administered in Parkinson's disease treatment combination L-dopa with inhibitors of aromatic L-amino acid decarboxylase (AADC) do not prevent L-dopa and dopamine inactivation by COMT to O-methylated products both in the periphery and the brain [2], thus inhibition of the catechol-O-methyltransferase is a new approach in the parkinsonism therapy. There is a strong therapeutic need to discover new COMT inhibitors because known inhibitors are of limited clinical use due to various shortcomings [3].

Applying programs LUDI and Discover for molecular modelling, including monitoring of binding properties and non-bonding interactions, it has been determined that the phosphonates and bisphosphonates are potent, novel COMT inhibitors theoretically better than the ones currently in use.

The series of computed phosphonates and bisphosphonates with different structure motif were synthesized by various, original method with satisfying yield.

- [1] Axelrod J., Tomchick R., *J. Biol. Chem.*, 233, 702 (1958)
- [2] Bonifati V., Meco G., *Pharmacol. Ther.*, 81 (1), 1 (1999)
- [3] Ruottinen H.M., Rinne U.K., *J. Neurol.* 245 [Suppl 3], 25 (1998)

## Postery – sekcia 2

### 2Po-Po1

#### ROZPUSTNOST ZLÚČENÍN S OBSAHOM ŽIARUVZDORNÝCH KOVOV

J. GABČOVÁ

Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov, Oddelenie anorganickej technológie

Korešpondenčný autor: jana.gabcova@stuba.sk

### 2Po-Po2

#### OCHRANA HLINÍKU VODIVÝMI VRSTVAMI VYTVÁŘENÝMI ELEKTROPOLYMERACÍ

I. JIRÍČEK, L. DIBLÍKOVÁ

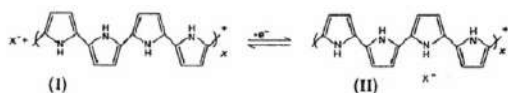
Ústav Energetiky, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 16628 Praha 6

Korešpondenčný autor: Ivo.Jiricek@vscht.cz

Vodivé povlaky jsou speciální polymery s konjugovanými dvojnými vazbami (p-vazbami) a vodivostí blížící se až vodivosti kovů. Na rozdíl od kovů se však vodivost mění stárnutím či protonizací/dopováním.

Pro práci byl vybrán polypyrrol (PPy), jehož konduktivita je v oxidovaném stavu na Obr. 1 uváděna až  $100 \text{ Scm}^{-1}$ . Nejlepší PPy vrstvy byly vytvářeny z kyseliny šťavelové chronoamperometrickou metodou. Tloušťka vytvořených PPy vrstev byla  $15 \mu\text{m}$ , jejich vodivost v intervalu  $0,1 - 10 \text{ Scm}^{-1}$ . Adhezi k substrátu lze podle mířkové zkoušky (ČSN ISO 2409) klasifikovat stupněm 2. PPy vrstvy poskytovaly krátko až střednědobou protikorozní ochranu hliníku v kyselém a chloridovém prostředí. Po vyčerpání oxidační kapacity a oddopování působí PPy vrstva jako fyzická bariéra. Vytvořená metodika umožňuje nanášet povlaky PPy na různé tvary i slitiny (dural, slitiny 2024 a 7075).

Práce vznikla za podpory VZ MSM CZ 6046137304



Obr 1 Přechem mezi neutrální (I) a oxidovanou (II) formou polypyrrolu (X- je dopující anion)

### 2Po-Po3

#### RING-FUNCTIONALIZED MOLYBDENOCENE COMPOUNDS

J. HONZÍČEK<sup>1</sup>, C.C. ROMÃO<sup>1</sup>, F.A. ALMEIDA PAZ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Tecnologia Química e Biológica da Universidade Nova de Lisboa, Av. da República, EAN, 2780-157, Oeiras

<sup>2</sup>Department of Chemistry, University of Aveiro, CICECO, 3810-193 Aveiro

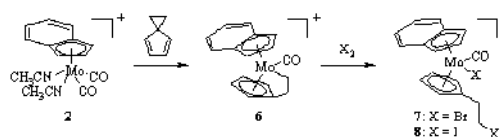
Korešpondenčný autor: hohonza@post.cz

Bent metallocene complexes  $\text{Cp}_2\text{MX}_2$  (M = Ti, V, Mo; X = halide) are currently under comprehensive scrutiny [1] due to their pronounced antitumor activity [2]. Following the quest for synthetic route enable to give variety of ring-functionalized metallocene compounds, the reactivity of dienophilic molybdenum compounds  $[\text{CpMo}(\text{CO})_2(\text{NCCH}_3)_2][\text{BF}_4]$  (**1**) and  $[\text{IndMo}(\text{CO})_2(\text{NCCH}_3)_2][\text{BF}_4]$  (**2**) was investigated. Reactions of **1** with spiro[2.4]hepta-4,6-diene give the complex  $[\text{CpMo}(\eta^4\text{-C}_5\text{H}_4(\text{CH}_2)_2)(\text{CO})_2][\text{BF}_4]$  (**3**), which is stable to ring-opening at room temperature, but its formation is accompanied by small amounts of ring-opening products  $[\text{CpMo}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_4\text{CH}_2\text{-}\eta^1\text{-CH}_2(\text{CO}))][\text{BF}_4]$  (**4**) and  $[\text{CpMo}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_4(\text{CH}_2)_2\text{-}\eta^1\text{-CO})(\text{CO})][\text{BF}_4]$  (**5**). The more electrophilic **2** reacts with spiro[2.4]hepta-4,6-diene giving  $[\text{IndMo}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_4\text{CH}_2\text{-}\eta^1\text{-CH}_2)(\text{CO})][\text{BF}_4]$  (**6**) as the sole product (see scheme). That compound was found to be suitable precursor for haloalkyl functionalized molybdenocene derivatives  $[\text{IndMo}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_4(\text{CH}_2)_2\text{X})(\text{CO})\text{X}][\text{BF}_4]$  (**7**: X = Br, **8**: X = I).  $[\text{IndMo}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_4\text{CH}_2\text{-}\eta^1\text{-CH}_2)(\text{CO})][\text{BF}_4]$  (**6**),  $[\text{IndMo}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_4(\text{CH}_2)_2\text{Br})(\text{CO})\text{Br}][\text{Br}] \cdot 0.5 \text{ H}_2\text{O}$  (**7a**) and  $[\text{IndMo}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_4(\text{CH}_2)_2\text{I})(\text{CO})\text{I}][\text{BF}_4]$  (**8**) are also structurally characterized and open the way to the new functionalized molybdenocene complexes applicable to biological purposes.

We are grateful to Fundação para a Ciência e Tecnologia (FCT, Portugal) for supporting through postdoctoral project SFRH/BPD/24889/2005.

[1] J. B. Waern, M. M. Harding, J. Organomet. Chem. 2004, 689, 4655-4668.

[2] P. Köpf-Maier, H. Köpf, Struct. Bonding 1988, 103.



**2Po-Po4****NOVÝ MATERIÁL PRO VÝROBU  
DETONAČNÍCH TRUBIC**Z. ŠRANK<sup>1</sup>, L. MASTNÝ<sup>2</sup>, P. VALENTA<sup>3</sup>, J. FIALA<sup>3</sup><sup>1</sup>Vysoká škola chemicko-technologická Praha<sup>2</sup>VŠCHT v Praze, Ústav anorganické chemie<sup>3</sup>Austin Detonator, s.r.o. Vsetín

Korešpondenčný autor: zlatko.srank@vscht.cz

V současné době jsou při některých trhacích pracích nahrazovány elektrické rozbušky rozbuškami neelektrickými s detonačními trubiciemi. Použití rozbušek s detonačními trubiciemi přináší uživatelům četné výhody, a to zejména v oblasti bezpečnosti, odolnosti k vlhkosti a variability tvorby roznětných sítí. Následným přínosem je i zvýšení produktivity a snížení nákladů na těžbu dobývaných hornin.

Jejich nevýhodou je skutečnost, že zbytky detonačních trubic kontaminují natěžený produkt. Přítomnost těchto zbytků způsobuje potíže při následné úpravě rubaniny, zejména při mletí a třídění. Jednou z možných a relativně snadno realizovatelných cest oddělení zbytků detonačních trubic od ostatních nemagnetických materiálů je jejich magnetická separace.

V příspěvku je popsáno řešení, které se týká materiálového složení detonačních trubic neelektrických rozbušek umožňující magnetickou separaci jejich zbytků z natěženého produktu. Předložené řešení spočívá v dvou a vícevrstvé konstrukci těla detonační trubice s tím, že alespoň jedna vrstva obsahuje ferromagnetickou látku. Obdobný postup byl úspěšně odzkoušen a v současné době se již i používá v solných dolech SRN k odstraňování zbytků izolace vodičů elektrických rozbušek, které kontaminují natěžený produkt.

Těžiště sdělení je zaměřeno na sledování vlivu použitých feromagnetických látek, včetně jejich koncentrace, na účinnost magnetické separace. V příspěvku je dále podchycen vliv použitých materiálů na změnu vybraných a současně sledovaných technických parametrů detonačních trubic (elektroizolační odpor, propustnost vody a vodní páry...).

Na předložené řešení byla podána přihláška vynálezu PV 682/2006 a průmyslového vzoru, kterému bylo uděleno osvědčení o zápisu užitného vzoru 18212/2006. V současné době je připravována ochrana i v zahraničí.

**2Po-Po5****VLIV STEARANŮ VYBRANÝCH SOLÍ NA  
STABILITU PVC**Z. ŠRANK<sup>1</sup>, J. VEVERKOVÁ<sup>1</sup>, L. MASTNÝ<sup>2</sup>, R. KALOUSKOVÁ<sup>1</sup>, M. PLÍŠKOVÁ<sup>1</sup><sup>1</sup>Vysoká škola chemicko-technologická Praha<sup>2</sup>VŠCHT v Praze, Ústav anorganické chemie

Korešpondenčný autor: zlatko.srank@vscht.cz

Do směsí PVC se před jejím zpracováním přidává řada aditiv. Mezi ně patří tepelné a světelné stabilizátory. Tepelné stabilizátory se přidávají za účelem potlačení tepelné degradace PVC, a to zejména během jeho tepelného namáhání při zpracovávání do výrobků. Světelné stabilizátory se přidávají za účelem potlačení degradace hotových výrobků z PVC a jeho směsí působením světla. Světelná degradace se negativně projeví zejména na vzhledu výrobku, může však výrazně ovlivnit i jeho významné užitné parametry, jako např. pevnost v tahu.

Předložená práce se zabývá vlivem podmínek syntézy na složení stearanu ceritého, zinečnatého a manganatého, zejména pak vlivem těchto stearanů na tepelnou a světelnou stabilitu výrobků z PVC.

Vliv syntetizovaných vzorků stearanů na tepelnou a světelnou stabilitu byl ověřen na zkušebních fóliích neměkčených směsí PVC. Byly připraveny folie obsahující různé molární poměry studovaných stearanů.

U zkušebních fólií byla sledována jak změna jejich barvy v závislosti na době tepelného namáhání, tak i množství odštěpeného chlorovodíku v průběhu statického tepelného namáhání.

Za účelem posouzení vlivu sledovaných materiálů na míru světelné stabilizace PVC byly výše uvedené zkušební vzorky fólii exponovány v Q-sun komoře. Stabilizační účinky byly hodnoceny jak na základě změny barvy, tak i množství odštěpeného chlorovodíku v průběhu statického tepelného namáhání fólií exponovaných světlem.

Podrobnější data k postupu přípravy předmětných stearanů, jejich charakterizaci, zejména pak k jejich stabilizačním účinkům, včetně vlivu chemického složení na stabilizační účinek jsou blíže popsány v posteru.

Tato práce byla řešena jako součást výzkumného záměru MSM 6046137302 „Příprava a výzkum funkčních materiálů a materiálových technologií s využitím mikro- a nano-skopických metod“.

**2Po-Po6****BIOLOGICAL ACTIVITY OF COPPER(II) COMPLEXES WITH BIDENTATE N-DONOR LIGANDS AND DICYANAMIDE ANION.**I. POTOČNÁK<sup>1</sup>, M. SABOL<sup>2</sup>, M. BURČÁK<sup>1</sup>, M. VAVRA<sup>1</sup>, A. DUDÁŠOVÁ<sup>2</sup><sup>1</sup>*Institute of Chemistry, Faculty of Science, P. J. Šafárik University*<sup>2</sup>*Institute of Medical Microbiology, Faculty of Medicine, P. J. Šafárik University*Korešpondenčný autor: [ivan.potocnak@upjs.sk](mailto:ivan.potocnak@upjs.sk)

With the aim to find possible correlations between the structure and biological activity of the copper(II) complexes, the series of nine compounds with the general formula of  $[\text{Cu}(\text{L})_2\text{N}(\text{CN})_2]\text{Y}$ , where L is 2,2'-bipyridine (bpy), 1,10-phenanthroline (phen) or 5,5'-dimethyl-2,2'-bipyridine (mbpy), and Y is -1 anion, have been prepared. All complexes were characterized by elemental analysis, IR spectroscopy and monocrystal structure analysis. The complexes are ionic and contain  $[\text{Cu}(\text{L})_2\text{N}(\text{CN})_2]^+$  complex cation and uncoordinated Y anions. Cu(II) atoms in the complex cations are five-coordinated in the form of a deformed trigonal bipyramid by two N-donor chelate bonded molecules of L and by monodentate N-coordinated dicyanamide anion.

Biological activity of the complexes was tested against medicinally important bacteria (*Enterococcus faecalis*, *Staphylococcus aureus*, *Streptococcus pyogenes*, *Escherichia coli*) and fungi (*Candida spp.*). Antiproliferative activity was investigated against L1210 leukemia. All tests were carried out by standard methods both in dimethylsulfoxide (dmsO) and water-ethanol solutions. The tests performed in dmsO solutions revealed increased activity of  $[\text{Cu}(\text{L})_2\text{N}(\text{CN})_2]\text{PF}_6$  (L is phen, bpy and mbpy) and  $[\text{Cu}(\text{phen})_2\text{N}(\text{CN})_2]\text{Y}$  (Y is  $\text{ClO}_4^-$ ,  $\text{BF}_4^-$  or  $\text{CF}_3\text{SO}_3^-$ ) compounds against bacteria and fungi with the MIC about  $32 \mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$  and L1210 leukemia with about 90% inhibition of proliferation at the concentration of  $10 \mu\text{M}$ . Nevertheless, the tests of bpy and phen compounds performed in water-ethanol solution did not confirm the observed activity and thus the activity of all reactants was investigated, too. The results indicate that the compounds have been decomposed in dmsO solution and for the observed activity solely phen and bpy molecules are responsible. On the other hand, the activity of the  $[\text{Cu}(\text{mbpy})_2\text{N}(\text{CN})_2]\text{PF}_6$  compound in water-ethanol solution is comparable with that one observed in dmsO.

*This work was supported by Slovak Grant Agency VEGA, Grant No. 1/2470/05.*

**2Po-Po7****VPLYV PRÍDAVKU  $\text{TiO}_2$  A  $\text{ZrO}_2$  NA TERMICKÚ STABILITU LÍTNOKREMIČITÝCH SKIEL VOČI KRYŠTALIZÁCIÍ.**V. PAVLÍK<sup>1</sup>, E. JÓNA<sup>2</sup>, V. MINÍKOVÁ<sup>2</sup><sup>1</sup>*Fakulta priemyselných technológií TnUAD, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov*<sup>2</sup>*Katedra chémie a technológie anorganických materiálov, Fakulta Priemyselných technológií v Púchove, Trenčianska Univerzita v Trenčíne*Korešpondenčný autor: [pavlik@fpt.tnuni.sk](mailto:pavlik@fpt.tnuni.sk)

The glasses with the composition of  $\text{Li}_2\text{O} \cdot 2 \text{SiO}_2 \cdot m \text{ZrO}_2 \cdot n \text{TiO}_2$  (where  $m, n = 0; 0,015; 0,031; 0,05; 0,075; 0,1; 0,15; 0,2$ ) were prepared and the relationship between structural and selected parameters of thermal stability vs. crystallization has been studied by X-ray diffraction, IR spectra and thermal analysis. The order of thermal stability vs. crystallization of studied glass systems based on the results of XRD is increasing out off 0,05 addition both oxides. The same order was obtained from the values of activation energy.

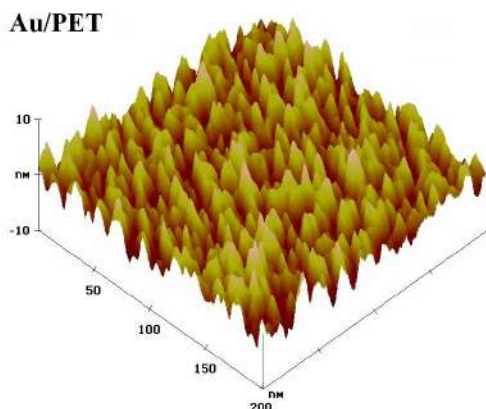
*Táto práca vznikla za podpory grantu KEGA 3/32 30/05.*

**2Po-Po8****POVRCHOVÉ VLASTNOSTI KOVOVÝCH NANOVRSTEV NA PET**P. SLEPIČKA<sup>1</sup>, J. SIEGEL<sup>1</sup>, V. ŠVORČÍK<sup>1</sup>, M. ŠLOUF<sup>2</sup>, M. ŠPÍRKOVÁ<sup>2</sup><sup>1</sup>*Vysoká škola chemicko-technologická Praha*<sup>2</sup>*Ústav makromolekulárnej chémie, Akadémie vied Českej republiky, Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6*Korešpondenčný autor: [petr.slepicka@vscht.cz](mailto:petr.slepicka@vscht.cz)

Au, Ag, Pd a Pt vrstvy byly naprašovány na polyethylenetereftalát (PET). Plošná rezistance vrstev byla měřena pomocí dvoubodové techniky. Povrchová topologie nanovrstev byla studována mikroskopii atomárních sil a skenovací elektronovou mikroskopii. Jejich tloušťka byla charakterizována transmisní elektronovou mikroskopii a atomovou absorpční spektroskopii. Chemická struktura kovových vrstev byla studována fotoelektronovou spektroskopii. Rezistance Au a Ag vrstev rapidně klesala s vytvořením spojitě kovové vrstvy. V případě Pt a Pd vrstev byl tento pokles pozvolnější. Naprašované Ag vrstvy byly oxidovány (XPS). Spojitě kovové vrstvy měly odlišnou topologii. Au a Pt vrstvy tvořily "červíkovitou" strukturu (SEM), zatímco Ag se skládalo z větších kulovitých klastrů a Pd vytvořilo homogenní vrstvu složenou z menších kulovitých klastrů. TEM mikroskopie ukázala odlišnou tloušťku spojitých kovových vrstev naprašovaných za stejných experimentálních podmínek. Při vytváření spojitě vrstvy hrála

hlavní roli nukleace oproti naprašovacímu výtěžku kovu.

Tato práce byla vypracována za podpory grantu GA ČR č.102/06/1106 a 204/06/0225, MSM č. 6046137302 a LC 06041, GAAS ČR č. KAN400480701 a A400500505.



AFM sken nespojitě Au vrstvy naprašované na PET (tloušťka 2,6 nm)

## 2Po-Po9

### CRYSTAL STRUCTURES AND MAGNETIC PROPERTIES OF THREE COPPER(II) TETRACYANOPLATINATE COMPLEXES

M. VAVRA<sup>1</sup>, I. POTOČNÁK<sup>1</sup>, E. ČIŽMÁR<sup>2</sup>, M. KAJŇAKOVÁ<sup>2</sup>, A. ORENDÁČOVÁ<sup>2</sup>, H. SCHMIDT<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Institute of Chemistry, Faculty of Science, P. J. Šafárik University

<sup>2</sup>Centre of Low Temperature Physics, P. J. Šafárik University and IEP SAS, Park Angelinum 9, SK-04154 Košice

<sup>3</sup>Institute of Inorganic Chemistry, Martin Luther University, Halle-Wittenberg, Kurt-Mothes-Street 2, D-06120 Halle

Korešpondenčný autor: martin.vavra@upjs.sk

With the aim to modify the formation of hydrogen bond system and to compare the structural and magnetic dimensionality in tetracyanoplatinates, the  $[\text{CuL}_2][\text{Pt}(\text{CN})_4]$  complexes (L = ethylenediamine (en), N,N'-dimethylethylenediamine (bmen) and N,N'-dimethylethylenediamine (dmen)) were prepared and characterized by elemental analysis, IR and UV-VIS spectroscopy and X-ray crystal structure analysis. Complexes are 1D covalent chains built of  $[\text{CuL}_2]^{2+}$  cations and  $[\text{Pt}(\text{CN})_4]^{2-}$  anions (Fig. 1). All  $\text{Cu}^{II}$  atoms lie on the inversion centres and form a deformed octahedron with  $\{\text{CuN}_6\}$  chromophore. Four nitrogen atoms from two L molecules are bonded in the equatorial plane with an average Cu-N distance of 2.022(2), 2.051(7) and 2.049(4) Å, respectively. Axial positions are occupied by two nitrogen atoms from bridging  $[\text{Pt}(\text{CN})_4]^{2-}$  anions at longer distance of 2.537(2), 2.493(8) and 2.600(5) Å, respectively.

The analysis of magnetic properties at very low temperatures shows that all complexes are characterized by the presence of weak antiferromagnetic exchange coupling. Magnetic interactions between  $\text{Cu}^{II}$  centres are mostly mediated by N-H...N interchain hydrogen bonds due to the orientation of magnetic orbitals perpendicular to the covalent chains. Despite the 1D character of the structures, specific heat analysis suggests that  $[\text{Cu}(\text{en})_2][\text{Pt}(\text{CN})_4]$  behaves as 2D spatially anisotropic square lattice Heisenberg magnet and  $[\text{Cu}(\text{bmen})_2][\text{Pt}(\text{CN})_4]$  as 2D square lattice Heisenberg magnet with nearest-neighbour and next-nearest-neighbour interactions, while more pronounced influence of interlayer coupling is observed in  $[\text{Cu}(\text{dmen})_2][\text{Pt}(\text{CN})_4]$ .

This work was supported by Slovak Grant Agency VEGA, Grant No. 1/2470/05, by APVV Grant No. 20-005204 and by the P.J. Šafárik University Internal Grant System, Grant No. VVGS 39/2006. M.V. thanks DAAD for financial support and hospitality of Martin Luther University in Halle.

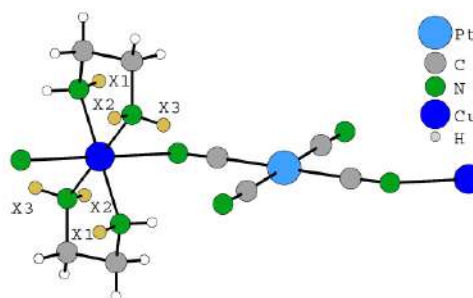


Fig. 1: General scheme for  $[\text{CuL}_2][\text{Pt}(\text{CN})_4]$  complexes: L = en: X1 = X2 = X3 = H; L = bmen: X1 = X2 = Me, X3 = H; L = dmen: X1 = H, X2 = X3 = Me

## 2Po-Po10

### VLIV POVRCHOVÉ ÚPRAVY ANATASU NA TEPELNOU A SVĚTELNOU STABILITU SMĚSÍ PVC

L. MASTNÝ<sup>1</sup>, R. KALOUSKOVÁ<sup>2</sup>, Z. ŠRANK<sup>2</sup>, R. SLAVĚTÍNSKÁ<sup>1</sup>, J. ŠIMEK<sup>3</sup>

<sup>1</sup>VŠCHT v Praze, Ústav anorganické chemie

<sup>2</sup>Vysoká škola chemicko-technologická Praha

<sup>3</sup>VŠCHT v Praze, Ústav polymerů, Technická 5, 166 28 Praha 6

Korešpondenčný autor: Libor.Mastny@vscht.cz

Titanová běloba, jejíž dominantní složkou je oxid titaničitý, je jedním z nejpoužívanějších pigmentů v oblasti zpracování plastů. Již v poměrně malé koncentraci zajistí díky svému vysokému indexu lomu ve viditelné oblasti světla požadovaný odstín zpracovávané směsi. Současně

využívá titanová běloba svých výjimečných vlastností k tomu, aby poskytla polymerní matici dostatečnou ochranu vůči negativním účinkům slunečního záření.

Anatas a rutil jsou dvě rozdílné pigmentové krystalografické modifikace oxidu titaničitého. Rutil je obecně pigmentem kvalitnějším, ale neplatí to pro všechny aplikace. Anatasové typy titanové běloby jsou vzhledem ke své měkčí textuře využívány především při výrobě vláken a pro nenáročné aplikace. Naopak rutilové typy s vysokou povrchovou úpravou se používají tam, kde se především vyžaduje výborná povětrnostní odolnost.

Anatasový typ titanové běloby je vhodným aditivem ve vláknařském průmyslu. Vysoký lesk transparentních vláken je potlačen nepatrným přídatkem anatasu. V současnosti dochází ze strany zpracovatelů plastických hmot ke zvyšování poptávky po povrchově upraveném anatasovém typu titanové běloby. Organická povrchová úprava umožňuje úspěšně použít tento typ i ve vyšších koncentracích k pigmentaci plastů.

V prezentovaném příspěvku je popsán vliv hydrofilní a hydrofobní organické povrchové úpravy na tepelnou a světelnou stabilitu neměkčených stabilizovaných směsí PVC. Získané výsledky jsou porovnány se stabilitou směsí PVC pigmentovaných jak běžným anatasem AV-01, tak speciálním typem AV-03 F/S s vyšším obsahem antimonu.

Z výsledků měření vyplývá, že organická povrchová úprava pigmentu jak v případě tepelné stability, tak v případě umělého povětrnostního stárnutí obecně zlepšuje všechny sledované optické parametry směsí. V průběhu jejich fotodegradace se rovněž významně potlačí proces dehydrochlorace polymeru. Negativní vliv na sledované parametry má pouze aplikace kombinace hydrofilní a hydrofobní povrchové úpravy.

*Tato práce byla řešena jako součást výzkumného záměru MSM 6046137302 Příprava a výzkum funkčních materiálů a materiálových technologií s využitím mikro- a nanoskopických metod*

## 2Po-Po11

### KINETIKA INTERKALACE ETHANOLAMINU DO ALFA-MODIFIKACE HYDROGENFOSFOREČNANU ZIRKONIČITÉHO

J. SVOBODA<sup>1</sup>, V. ZIMA<sup>1</sup>, K. MELÁNOVÁ<sup>1</sup>, L. BENEŠ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ústav makromolekulární chemie, Akademie věd České republiky, Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6

<sup>2</sup>Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická

Korešpondenční autor: Jan.Svoboda@upce.cz

V minulosti jsme studovali interkaláty připravené reakcí  $\alpha$ -Zr(HPO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>·H<sub>2</sub>O (dále  $\alpha$ -ZrP) s aminoalkoholy[1]. V závislosti na molárním poměru výchozích látek byl pozorován vznik několika fází obecného vzorce  $\alpha$ -

Zr(HPO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>·xNH<sub>2</sub>(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>OH·zH<sub>2</sub>O (x = 0.5, 1, 2; n = 2-6; z = 0.2-1.2). V této práci jsme se zaměřili na studium kinetiky této interkalační reakce s ethanolaminem jako hostem.

K vodné suspenzi  $\alpha$ -ZrP byl přidáván 0.2M vodný roztok ethanolaminu tak, aby bylo zajištěno konstantní pH v průběhu reakce v rozmezí 6.00±0.05-7.50±0.05 s krokem 0.5. Teplota byla udržována termostatem na hodnotě 25.0±0.1°C. Výsledkem každého měření byla závislost molárního poměru interkalovaného ethanolaminu k výchozímu  $\alpha$ -ZrP na čase pro jednotlivé hodnoty pH. Pevné produkty po interkalaci byly separovány filtrací a charakterizovány práškovou rentgenovou difrakcí a termogravimetrií. Izolovány byly celkem tři fáze,  $\alpha$ -Zr(HPO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>·0.5NH<sub>2</sub>(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>OH·zH<sub>2</sub>O (A),  $\alpha$ -Zr(HPO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>·NH<sub>2</sub>(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>OH·zH<sub>2</sub>O (B) a  $\alpha$ -Zr(HPO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>·1.5NH<sub>2</sub>(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>OH·0.5H<sub>2</sub>O (C).

Bylo zjištěno, že interkalace ethanolaminu probíhá postupně. Nejprve vzniká interkalát A obsahující jednu molekulu nainterkalovaného ethanolaminu na dvě vzorcové jednotky  $\alpha$ -ZrP. Po určité indukční periodě dochází k další interkalaci a vzniká produkt B. Tento interkalát B (z = 0.2-1.2) je konečným produktem při hodnotách pH v rozmezí 6.00-7.00. V případě, že hodnota pH je 7.50, vzniká interkalát C jako konečný produkt. S rostoucím pH se rychlost interkalace zvyšuje a zároveň se zkracuje indukční perioda mezi jejím prvním a druhým stupněm. Při pH=7.50 pravděpodobně již od počátku vzniká interkalát B, který dále přechází na interkalát C.

*Autoři děkují GA ČR za poskytnutou finanční pomoc (grant č. 203/05/2306).*

[1] L. Beneš, K. Melánová, V. Zima, P. Patrono, P. Galli: Eur. J. Inorg. Chem. (2003) 1577-1580.

## 2Po-Po12

### SYNTHESIS AND ANTIBACTERIAL ACTIVITY OF SILVER COLLOID NANOPARTICLES

A. PANÁČEK<sup>1</sup>, L. KVÍTEK<sup>2</sup>, R. PRUCEK<sup>1</sup>, J. SOUKUPOVÁ<sup>1</sup>, M. KOLÁŘ<sup>3</sup>, R. VEČEŘOVÁ<sup>3</sup>, R. ZBOŘIL<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta, Katedra fyzikální chemie

<sup>2</sup>Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta

<sup>3</sup>Univerzita Palackého v Olomouci, Lékařská Fakulta, Ústav mikrobiologie

Korešpondenční autor: panacek@prfnw.upol.cz

Silver has been known for antibacterial activity since the times of ancient Greece. Currently, the investigation of this phenomenon has regained importance due to the increase of bacterial resistance to antibiotics, caused by their overuse. Recently, silver nanoparticles as well as various silver-based compounds containing ionic silver



(Ag<sup>+</sup>) or metallic silver (Ag<sup>0</sup>) exhibiting antimicrobial activity have been synthesized. Antibacterial activity of the silver containing materials can be used, for example, in medicine to reduce infections in burn treatment as well as to prevent bacteria colonization on prostheses [1].

In recent studies, a synthesis using a Tollens process was used to demonstrate the formation of silver particles with controlled size in a one-step process. This process was easily controllable by changing the concentration of complexing agent, ammonia, of the silver ion and using a range of reducing saccharides [2].

A one-step simple synthesis of silver colloid nanoparticles with controllable sizes is presented. In this synthesis, reduction of [Ag(NH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>]<sup>+</sup> complex cation by four saccharides was performed. Four saccharides used were two monosaccharides (glucose and galactose) and two disaccharides (maltose and lactose). The syntheses performed at various ammonia concentrations (0.005 - 0.20 mol L<sup>-1</sup>) and pH conditions (11.5 - 13.0) produced a wide range of particle sizes (25-450 nm) with narrow size distributions, especially at the lowest ammonia concentrations. The reduction of [Ag(NH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>]<sup>+</sup> by maltose produced silver particles with a narrow size distribution with an average size of 25 nm, which showed high bactericidal activity against Gram-positive and Gram-negative bacteria, including highly multiresistant strains such as methicillin-resistant *Staphylococcus aureus*. Antibacterial activity of silver nanoparticles was found to be dependent on the size of silver particles. A very low concentrations of silver as low as 1.69 μg/mL Ag gave antibacterial performance [3].

- [1] J. R. Morones, J. L. Elechiguerra, A. Camacho, K. Holt, J. B. Kouri, J. T. Ramirez, M. J. Yacaman, *Nanotechnology*, 16, 2346-2353, (2005).
- [2] L. Kvítek, R. Pucek, A. Panáček, R. Novotný, J. Hrbáč, R. Zbořil, J. Mater. Chem., 15, 1099-1105, (2005).
- [3] A. Panáček, L. Kvítek, R. Pucek, M. Kolář, R. Večeřová, N. Pizúrová, V. K. Sharma, T. Nevěčná, R. Zbořil, *J. Phys. Chem B*, 110, 16248-16253, (2006).

## 2Po-Po13

### VLASTNOSTI SKEL SYSTÉMU Li<sub>2</sub>O - TiO<sub>2</sub> - TeO<sub>2</sub>

J. OŽĎANOVÁ, H. TICHÁ

Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Katedra obecné a anorganické chemie

Korešpondenčný autor: [jitka.ozdanova@student.upce.cz](mailto:jitka.ozdanova@student.upce.cz)

Byly studovány vlastnosti skel chemického složení x Li<sub>2</sub>O - x TiO<sub>2</sub> - (100-2x) TeO<sub>2</sub>, kde x = 7,5; 10; 12,5 a 14 mol%. Dále byl připraven materiál 15 Li<sub>2</sub>O - 5 TiO<sub>2</sub>

- 80 TeO<sub>2</sub>; důvodem pro rozšíření této řady bylo studium jednak společného vlivu Li<sub>2</sub>O a TiO<sub>2</sub> na telluritovou matici, a také vlivu rostoucího obsahu TiO<sub>2</sub> na vlastnosti výsledného produktu.

Přímou syntézou v platinovém kelímku při teplotě 800 - 900°C byly získány sklovité, vizuálně čiré vzorky žlutého až žlutooranžového zbarvení. Na připravených vzorcích byly studovány kompoziční závislosti hustoty, molárního objemu a charakteristických teplot získaných z termomechanické analýzy; změny struktury pomocí Ramanových a infračervených spekter a optické vlastnosti v oblasti krátkovlnné absorpční hrany.

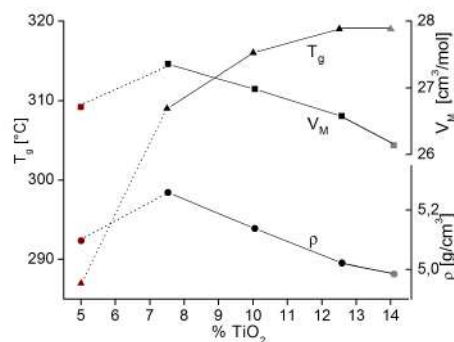
Ze získaných závislostí vyplývá, že TiO<sub>2</sub> přispívá k zesíťování struktury. Li<sub>2</sub>O vykazuje vůči TiO<sub>2</sub> konkurenční působení a zvyšování jeho koncentrace způsobuje téměř lineární pokles hustoty a molárního objemu, což souvisí zejména s fyzikálními vlastnostmi kationtu lithného.

Ramanova spektra potvrzují, že s rostoucím obsahem Li<sub>2</sub>O dochází k transformaci strukturálních jednotek TeO<sub>4</sub> na TeO<sub>3</sub>. Relativní vzrůst intenzity ramene při n 740 cm<sup>-1</sup> vůči hlavnímu pásu při n 660 cm<sup>-1</sup> může být těžkí indicií pro přítomnost komplexních polyaniontů Te<sub>3</sub>O<sub>8</sub><sup>4-</sup> nebo Te<sub>2</sub>O<sub>5</sub><sup>2-</sup>. O přítomnosti vyšších telluričitanů ve struktuře svědčí též existence pásu při n 850 cm<sup>-1</sup> v infračervených spektrech [1].

Ze studovaných kompozičních závislostí lze navrhnout, že TiO<sub>2</sub> vstupuje do telluritové sítě, kde může i nahrazovat tellur (r(Te) r(Ti)). Kationt lithný, bude pravděpodobně součástí vyšších telluričitanů.

Tato práce vznikla za finanční podpory Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR v rámci projektu MSM VZ 0021627501.

- [1] M. Dimitrova-Pankova, Z. Dimitriev, M. Arnaudov, V. Dimitrov: *Phys. Chem. Glasses* Vol. 30 No. 6 (1989), 260-263.



1: Kompoziční závislost transformační teploty, hustoty a molárního objemu studovaných materiálů (spojovací linie slouží pouze jako vodítka pro oči).



## 2Po-Po14

**VYBRANÉ VLASTNOSTI SKEL SYSTÉMU  
 $x\text{PbO}-20\text{Bi}_2\text{O}_3-(80-x)\text{B}_2\text{O}_3$** 

K. KOTKOVÁ, H. TICHÁ

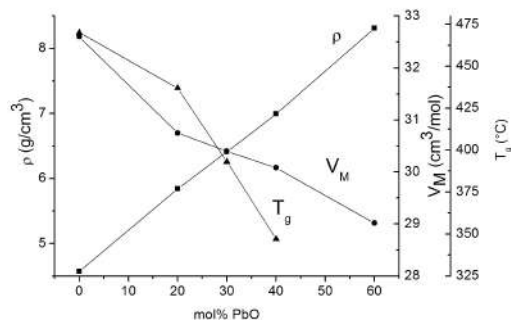
*Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Katedra obecné a anorganické chemie*
Korešpondenčný autor: *katerina.kotkova@student.upce.cz*

Byla studována skla systému  $x\text{PbO}-20\text{Bi}_2\text{O}_3-(80-x)\text{B}_2\text{O}_3$ , kde  $x = 0, 20, 30, 40, 60$  mol%. Syntéza vzorků byla provedena tavením v platinovém kelímku při teplotě  $850^\circ\text{C}$ . Byly získány vizuálně sklovité slitky, barva slitky závisela na míře náhrady  $\text{B}_2\text{O}_3$  (čirá  $\rightarrow$  žlutá  $\rightarrow$  oranžová). Na vhodně připravených sklech byly studovány: hustota ( $\rho$ ), molární objem ( $V_M$ ), dilatometrická teplota skelné transformace ( $T_g$ ). Změny ve struktuře byly sledovány pomocí Ramanovy a infračervené spektroskopie.

Získané kompoziční závislosti jsou spíše nemonotónické. Protože je hustota méně citlivá ke změně struktury než molární objem, byly hodnoceny kompoziční závislosti  $V_M(x)$  (obr.1). Experimentální Ramanova spektra potvrzují změnu struktury skel vyvolanou substitucí  $\text{B}_2\text{O}_3$  oxidem olovnatým [1]. Postupný přídavek 20 mol% PbO do výchozího  $20\text{Bi}_2\text{O}_3-80\text{B}_2\text{O}_3$  na úkor  $\text{B}_2\text{O}_3$ , má za následek postupnou konverzi  $\text{BO}_3 \leftrightarrow \text{BO}_4$ . Konverze je spojena s kontrakcí molárního objemu (obr.1). Další přídavek 20-30-40 mol% ovlivňuje směrnici závislosti  $V_M(x)$  málo, ale má velký vliv na průběh  $T_g(x)$ . Domníváme se, že v této oblasti složení leží „bod zvratu“ přeměny  $\text{BO}_4 \leftrightarrow \text{BO}_3$ . Důvodem může být povaha vazby Pb-O; s růstem koncentrace PbO roste koncentrace  $\text{BO}_4$  a klesá koordinační číslo kyslíku u části vazeb Pb-O. Donor-akceptorové vazby Pb-O se nemohou tvořit a dochází ke zpětné konverzi  $\text{BO}_4 \leftrightarrow \text{BO}_3$ , což je spojeno s poklesem molárního objemu skel.

*Tato práce vznikla za finanční podpory Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR v rámci projektu MSM 0021627501.*

[1] Meera, B. N., Ramakrishna, J.: Journal of Non-Crystalline Solids 159(1993): 1-21.



Obr. 1 Závislost molárního objemu, hustoty a teploty skelné transformace skel  $x\text{PbO}-20\text{Bi}_2\text{O}_3-(80-x)\text{B}_2\text{O}_3$ . Spojovací linie jsou pouze pro vedení oka.

## 2Po-Po15

**SORPCE OXOANIONTŮ ARSENU NA  
 MODIFIKOVANÝ KAOLIN A JEHO POROVNÁNÍ  
 S KOMERČNÍMI SORBETÝ**
L. FUITOVÁ<sup>1</sup>, S. HEISLER<sup>2</sup>, B. KIEHLING<sup>2</sup>, B. DOUŠOVÁ<sup>1</sup>, W. HOLL<sup>2</sup><sup>1</sup>VŠCHT Praha, Ústav chemie pevných látek, Technická 5, 166 28 Praha 6<sup>2</sup>Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Institute for Technical Chemistry, Section Water and GeotechnologyKorešpondenčný autor: *Lucie.Fuitova@vscht.cz*

Kaolin patří mezi jílové minerály s povrchovým nábojem závislým na pH roztoku. Z důvodu nízkého pH izoelektrického bodu nepatří k typickým sorbetům aniontů. Úpravou jeho povrchu však můžeme pH, které odpovídá nulovému povrchovému náboji, zvýšit. Efektivní a jednoduché jsou modifikace pomocí iontů železa, hliníku a manganu. Sorpce oxoaniontu As(V) na kaolin modifikovaný všemi jednotlivými ionty byla účinná z 90-99 %. Pro sorpci oxoaniontu As(III) bylo dosaženo nejlepších výsledků pro kaolin upravený ionty manganu (65-70 %). Sorpce na syntetický materiál GFH (granulovaný FeOOH) a polymerní sorbent AsXnp (oxid hydroxid železa) probíhala z 95-99 % pro obě formy As. Doba ustanovení rovnováhy mezi pevnou a kapalnou fází byla stanovena na 72 h pro kaolin a pro syntetické sorbenty na 24 h. Maximální sorpční kapacita materiálů je vždy vyšší pro sorpci oxoaniontu As(V) než As(III). Je to dáno tím, že areničnan tvoří na povrchu sorbetu stabilní vnitřní komplexy, zatím co arsenitan je tvoří pouze částečně spolu s méně stabilními vnějšími komplexy. Významným faktorem pro sorpci oxoaniontů As je zároveň pH původního roztoku. Bylo dosaženo vysokých sorpčních kapacit u modifikovaného kaolinu. Nejlepší výsledky byly získány pro sorpci As(V) na kaolin upravený hliníkem, a to 47 mg/g. Tato hodnota převyšuje sorpční kapacitu obou komerčních sorbetů.

*Práce byla podpořena VZ MŠMT ČR č. 6046137302 a projektem GA AVČR č.A401250701.*

[1] Goldberg, S.; Johnston, C. 2001. Mechanisms of Arsenic Adsorption on Amorphous Oxides Evaluated Using Macroscopic Measurements, Vibrational Spectroscopy, and Surface Complexation Modeling. J. Colloid Interface Sci. 234: 204-216.

[2] Stachowicz, M.; Hiemstra, T.; Riemsdijk, W. 2006. Surface speciation of As(III) and As(V) in relation to charge distribution. J. Colloid Interface Sci. 302: 62-75.

- [3] Hlavay, J.; Polyak, K. 2005. Determination of surface properties of iron hydroxide-coated alumina adsorbent prepared for removal of arsenic from drinking water. *J. Colloid Interface Sci.* 284: 71-77.

## 2Po-Po16

### FOTOKATALYTICKÁ AKTIVITA TIŠTĚNÝCH VRSTEV TiO<sub>2</sub>

J. CHOMOUCKÁ<sup>1</sup>, P. DZIK<sup>1</sup>, L. RÁBOVÁ<sup>2</sup>, M. VESELÁ<sup>2</sup>, M. VESELÝ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>VUT v Brně, Fakulta chemická, Ústav fyzikální a spotřební chemie

<sup>2</sup>VUT v Brně, Fakulta chemická

Korešpondenční autor: [chomoucka@fch.vutbr.cz](mailto:chomoucka@fch.vutbr.cz)

Fotokatalytické technologie se stávají stále více atraktivnější pro průmysl dnešní doby, zvláště z důvodu globálního znečištění životního prostředí. Hlavním cílem je výzkum zpracování a čištění vody, vzduchu a zacházení s odpadem. Mezi různými polovodičovými materiály přitahuje velkou pozornost oxid titaničitý, a to hlavně pro svou silnou oxidační schopnost, chemickou netečnost a netoxicitu. Dosud byla fotokatalýza s TiO<sub>2</sub> úspěšně aplikována na čištění vzduchu a vody. Fotokatalyzátor byl ale používán ve formě prášku, jehož nevýhodou byla nutnost jeho následného odstranění. Z toho důvodu byla vyvinuta technika nanášení tenkých filmů oxidu titaničitého na povrch různých materiálů a takto připravené povrchy byly zkoumány z hlediska fotokatalytické aktivity a změny fotoindukované hydrofility.

Katalyzátor TiO<sub>2</sub> je považován za efektivní pro antimikrobiální účely. Ozářovaný oxid titaničitý katalyzuje produkci radikálů a dalších oxidačních činidel jako jsou peroxid vodíku a superoxydy. Když jsou takovéto reaktivní kyslíkové druhy (ROS) v přímém nebo v úzkém kontaktu s mikroorganismy, dochází k ataku povrchu těchto mikroorganismů, což vede k poruše různých funkcí, struktur a následně k jejich záhoubě.

Byly připraveny transparentní vrstvy oxidu titaničitého na sodnovápenatých sklíčkách sol-gel procesem. Pro zamezení nežádoucí difúze sodíkových iontů do vrstvy katalyzátoru byla sklíčka před přípravou tenkých filmů vyvařena v kyselině sírové. Skleněné nosiče byly ovrstvovány metodou tisku.

Fotokatalytická aktivita byla zjišťována fotodegradací 2,6-dichlorindofenolu na deskovém reaktoru. Vyhodnocení úbytku koncentrace 2,6-dichlorindofenolu bylo provedeno spektrofotometricky.

Antimikrobiální vlastnosti transparentních vrstev TiO<sub>2</sub> byly testovány na kvasince *Candida Tropicalis*, míra přežití kvasinek byla určována během reakce přímou metodou s epifluorescenčním mikroskopem a barvením buněk Akridinovou oranží.

*Tato práce vznikla za podpory grantu FRVŠ 1665/2007*

- [1] Okura, I., Kaneko, M.: Photocatalysis, Science and Technology, Faculty of Science, Tokyo, 2002, ISBN 4-06-210615-9
- [2] Paz, Y., Keller, A.: *J. Mater. Res.*, 12 (10) (1997) 2759
- [3] Gelever, S., Goméz, L.A., Reyes, K., Leal, M.T.: *Water Res.*, 40 (2006) 3274

## 2Po-Po17

### STUDIUM FOSFÁTOVÝCH SKEL DOTOVANÝCH OXIDEM BISMUTITÝM

J. ŠUBČÍK<sup>1</sup>, J. JIRÁK<sup>2</sup>, L. KOUDELKA<sup>1</sup>, P. MOŠNER<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Katedra obecné a anorganické chemie, Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická

<sup>2</sup>Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická

Korešpondenční autor: [jiri.subcik@student.upce.cz](mailto:jiri.subcik@student.upce.cz)

Bylo studováno celkem 10 skelných vzorků ve dvou ternárních systémech: 50BaO-xBi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-(50-x)P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> a 50PbO-xBi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-(50-x)P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, kde x se mění v obou systémech v rozmezí 0-10 mol% Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Skla byla připravována reakcí PbO, BaCO<sub>3</sub>, Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub> a H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>. Po předchozí kalcinaci byla zhomogenizovaná směs výchozích komponent postupným zahřevem na 1150-1250°C roztavena a následně byla vzniklá tavenina nalita do grafitové formy a chlazená volně na vzduchu.

V obou ternárních systémech byla připravená skla charakterizována měřením měrné hmotnosti, molárního objemu, dále metodami DSC a Ramanovou spektroskopii. Krystalické fáze vznikající při ohřevu práškových vzorků byly identifikovány pomocí rentgenové difrakční analýzy.

Pomocí tepelně vodivostní DSC práškových vzorků skel bylo zjištěno, že hodnoty transformační teploty skel stoupají v obou skelných systémech s rostoucím obsahem Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, v systému 50BaO-xBi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-(50-x)P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> se jejich hodnoty mění v rozmezí 469-561°C, v systému 50PbO-xBi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-(50-x)P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> se pak pohybují v intervalu 326-403°C.

Podchlazené kapaliny vznikající při ohřevu skelných vzorků v obou systémech podléhají krystalizaci. V systému 50BaO-xBi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-(50-x)P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> se krystalizační teploty pohybují v teplotním rozmezí 537-637°C a v systému 50PbO-xBi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-(50-x)P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> v rozmezí 380-549°C. Pomocí rentgenové difrakční analýzy byly v systému 50BaO-xBi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-(50-x)P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> identifikovány produkty krystalizace podchlazených kapalin. Vzniklé krystalické fáze jsou nejčastěji tvořeny fosforečnany barnatými - Ba<sub>3</sub>P<sub>4</sub>O<sub>13</sub>, Ba(PO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> a fosforečnany bismutitými - Bi<sub>23</sub>P<sub>4</sub>O<sub>44,5</sub>, BiPO<sub>4</sub>.

Studium Ramanových spekter ukázalo, že vestavování  $\text{Bi}_2\text{O}_3$  do skelné sítě vede k depolymerizaci fosfátové strukturální sítě skel. Nalezené spektrální pásy byly přiřazeny vibracím jednotlivých elementárních strukturálních celků.

Tato práce vznikla za finanční podpory Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR v rámci projektu MŠMT VZ 0021627501.

## 2Po-Po18

### OXOKOMPLEXY VANÁDU(V) S ANIÓNNI KYSELINY VÍNNEJ

J. GÁLIKOVÁ<sup>1</sup>, P. SCHWENDT<sup>2</sup>, Z. ŽÁK<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Bratislava

<sup>2</sup>Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra anorganickej chémie

<sup>3</sup>Masarykova Univerzita v Brne, Prírodovedecká fakulta, Katedra anorganickej chémie

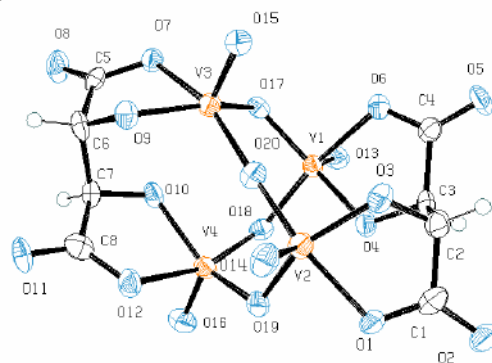
Korešpondenčný autor: galikova@fns.uniba.sk

Tmavočervené štvorjadrové komplexy  $\text{M}_4[\text{V}_4\text{O}_8(\text{R,R-tart})_2] \cdot \text{aq}$  a  $\text{M}_4[\text{V}_4\text{O}_8(\text{rac-tart})_2] \cdot \text{aq}$  ( $\text{tart} = \text{C}_4\text{H}_2\text{O}_6^{4-}$ ) boli izolované z mierne kyslého prostredia (pH 6) z reakčných systémov  $\text{V}_2\text{O}_5$ —kyselina vínna (R,R- alebo racemická)— $\text{MOH}$ — $\text{H}_2\text{O}$ —acetón ( $\text{M} = \text{N}(\text{CH}_3)_4^+$ ,  $\text{N}(\text{C}_2\text{H}_5)_4^+$ ), prípadne zo systémov  $\text{MVO}_3$ —kyselina vínna— $\text{H}_2\text{O}$ —acetón ( $\text{M} = \text{K}^+$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{NH}_4^+$ ).

Po ďalšom znížení pH (2,5) z roztokov kryštalizovali červené dvojjadrové komplexy  $\text{M}_2[\text{V}_2\text{O}_2(\text{rac-tart})_2]$  ( $\text{M} = \text{N}(\text{CH}_3)_4^+$ ,  $\text{N}(\text{C}_2\text{H}_5)_4^+$ ,  $\text{N}(\text{C}_4\text{H}_9)_4^+$ ), ktoré je však možné pripraviť len reakciou s racemickou kyselinou vínnou.

Komplexy  $(\text{N}(\text{C}_2\text{H}_5)_4)_4[\text{V}_4\text{O}_8(\text{R,R-tart})_2] \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  (obr.1) a  $(\text{N}(\text{C}_2\text{H}_5)_4)_2[\text{V}_2\text{O}_2(\text{rac-tart})_2]$  boli charakterizované IČ spektroskopiou, elementárnou analýzou a RTG štruktúrnou analýzou.

Táto práca vznikla s podporou Univerzity Komenského (Grant UK/172/2007) a MŠ SR (Grant VEGA 1/4462/07).



Obr. 1 Štruktúra aniónu  $[\text{V}_4\text{O}_8(\text{R,R-tart})_2]^{4-}$

## 2Po-Po19

### LOW-DIMENSIONAL CYANO COMPLEXES WITH $[\text{Cu}(\text{tacn})]^{2+}$ BUILDING BLOCK

J. KUCHÁR<sup>1</sup>, J. ČERNÁK<sup>1</sup>, W. MASSA<sup>2</sup>

<sup>1</sup>University of P. J. Šafárik, Faculty of Sciences, Institute of Chemistry, Dept. of Inorganic Chemistry

<sup>2</sup>Fachbereich Chemie, Philipps-Universität

Korešpondenčný autor: juraj.kuchar@upjs.sk

Studies of various phenomena associated with magnetism are of current interest of chemists and physicists. It is well known that besides covalent bonds also hydrogen bonds (HBs) may play an important role in mediating magnetic exchange interactions. In order to study the correlation between structural and magnetic dimensionality, and the role of hydrogen bonds, we have investigated the aqueous systems  $\text{Cu}^{2+} - L_N - [\text{M}(\text{CN})_4]^{2-}$  ( $\text{M} = \text{Ni}, \text{Pd}, L_N = \text{tacn}$ ) and could structurally characterize three novel compounds  $\text{Cu}(\text{tacn})\text{Ni}(\text{CN})_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$  (**1**),  $\text{Cu}(\text{tacn})(\text{H}_2\text{O})\text{Ni}(\text{CN})_4$  (**2**) and  $\text{Cu}_3(\text{tacn})_3\text{Pd}_2(\text{CN})_8\text{Br}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$  (**3**), respectively. Complexes **1** and **2** exhibit 2,2-CT type chain structure built up of  $[\text{Cu}(\text{tacn})(\text{H}_2\text{O})_x]^{2+}$  cations ( $x = 0, 1$ ) and square  $[\text{Ni}(\text{CN})_4]^{2-}$  anions. On the other hand, the structure of **3** contains two different types of chains. The first one is analogous to that found in **1** and **2**, while the second chain is of the 2,4-ribbon type in which the anion exhibits connectivity four. In the respective compounds **1-3** various hydrogen bonding systems different from that found in previously studied compounds  $\text{Cu}(L_N)_2\text{M}(\text{CN})_4$  ( $L_N = N$ -methylethylenediamine (*men*), *N,N*-dimethylethylenediamine (*dmen*)) [1,2] are present. The results are discussed.

This work was supported by the Grants APVV (20-005204) and VEGA (1/3550/06).

[1] Kuchár J., Černák J., Mayerová Z., Kubáček P., Žák Z.: Solid State Phenomena, 90-91 (2003) 328.

[2] Kuchár J., Černák J., Abboud K. A.: Acta Cryst., C60 (2004) 492.

<sup>2</sup>Institute for Material and Technological Research, I.Krasku 491/30, 020 01 Púchov

Korešpondenčný autor: *istanova@fpt.tnuni.sk*

## 2Po-Po20

### STANOVENÍ DÉLKY ŘETĚZCE KONDENZOVANÝCH FOSFOREČNANŮ PRO HODNOCENÍ KVALITY JEJICH VÝROBY

P. BĚLINA, E. BRETŠNAJDROVÁ, L. SVOBODA

*Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10, Pardubice*

Korešpondenčný autor: *petr.belina@upce.cz*

V rámci této práce byla vypracována rychlá analytická metoda pro stanovení délky řetězce kondenzovaných fosforečnanů, kterou lze využít pro orientační hodnocení kvality při výrobě vybraných fosforečných solí. Sodné soli kondenzovaných fosforečnanů (tripolyfosfát sodný, pyrofosfát sodný a hexametafosfát sodný) byly pomocí silně kyselého katexu převedeny na příslušné kyseliny, které byly následně automaticky titrovány roztokem hydroxidu sodného. Bod ekvivalence byl vyhodnocen potenciometricky. Hodnoty pH byly automaticky zaznamenávány v čase do počítače, příslušnému času odpovídal objem přidaného titračního činidla. V případě pyrofosfátu sodného a hexametafosfátu sodného se na derivované titrační křivce objevují dvě maxima, u tripolyfosfátu sodného tři maxima, odpovídající titraci jednotlivých vodíků. Ze spotřeby titračního činidla mezi jednotlivými body ekvivalence lze určit délku řetězce kondenzovaných fosforečnanů. V případě tripolyfosfátu a pyrofosfátu se ukázalo jako výhodnější odečítat hodnotu spotřeby titračního činidla nikoliv ze získaného grafu, ale ze známé hodnoty pH při které nastává bod ekvivalence, resp. ze známé hodnoty disociační konstanty těchto solí. Tento postup však nelze použít pro hexametafosfát. Pomocí této metody lze tedy snadno a rychle zjistit, zda vyrobený produkt vykazuje hodnotu délky řetězce blízkou hodnotě teoretické či nikoliv a zda lze tedy v produktu předpokládat výskyt nižších či vyšších fosforečnanů. Hodnota délky řetězce však nevypovídá nic o kvantitativním zastoupení těchto příměsí.

*Tato práce vznikla v rámci projektu MŠMT ČR č. 0021627501.*

## 2Po-Po21

### MORPHOLOGY OF OXIDIC LAYERS PREPARED BY SOL-GEL

I. STAŇOVÁ<sup>1</sup>, D. BAKOŠOVÁ<sup>1</sup>, A. LUKÁČ<sup>1</sup>, J. PAGÁČOVÁ<sup>1</sup>, A. PLŠKO<sup>1</sup>, P. KOŠTIAL<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Faculty of Industrial Technologies, University of Alexander Dubček in Trenčín, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov

Thin layers of titanium dioxide, zirconium dioxide and silicon dioxide are extensively studied because of their interesting chemical, electrical and optical properties. These layers were obtained in sol-gel process and prepared as thin layers on microscope slide glasses by dip-coating method. In order to define the influence of modification on surface properties (e.g., roughness) and morphology, various types of precursors were used. The topography was investigated with the use of atomic force microscopy (AFM).

- [1] DU, J., RÄDLEIN, E., FRISCHAT, G.H.: Journal of Sol-Gel Science and Technology 13, 1998, 763-767
- [2] GRÝČOVÁ, A., KEJMAROVÁ, G., MATOUŠEK, J.: Ceramics - Silikáty 46 (2), 2002, 49-51
- [3] FRISCHAT, G.H., POGGEMANN, J.F., HEIDE, G.: Journal of Non-Crystalline Solids 345&346, 2004, 197-202

## 2Po-Po22

### THERMAL BEHAVIOR OF PRECURSOR GELS TiO<sub>2</sub> THIN FILMS

J. PAGÁČOVÁ, A. PLŠKO, A. LUKÁČ, I. STAŇOVÁ, L. MARČEKOVÁ, K. FATUŘÍKOVÁ

*Faculty of Industrial Technologies, University of Alexander Dubček in Trenčín, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov*

Korešpondenčný autor: *pagacova@fpt.tnuni.sk*

In this research the TiO<sub>2</sub> sols were prepared by sol-gel process. The precursor sols consist of a mixture of titanium alkoxide (Ti(OPr)<sub>4</sub>), isopropanol, water and nitric acid. The sols were stabilized by different amount of acetylacetone. Differential thermal analysis was performed on the precursor powders. The gels DTA analysis shows the bands attributed to water removal and pyrolysis of organics which are formed by the acetylacetonato complexes. When the heating rate increases the peaks of decomposition extend and their position moves toward higher temperatures.

*This study was supported by the grant VEGA 1/3161/06.*

- [1] BRINKER, C.J., SCHERER, G.W.: Sol-Gel Science - The Physics and Chemistry of Sol-Gel Processing. Academic Press, Boston 1990.
- [2] TRAVERSA, E. et al.: Sensors and Actuators B, 31, 1996, 59.
- [3] KUZNETSOVA, I.N. et al.: Materials Science and Engineering B, 137, 2007, 31.

**2Po-Po23****FYZIKÁLNĚ-CHEMICKÉ A KOROZNĚ-INHIBIČNÍ VLASTNOSTI ORTHOFOSFOREČNANŮ LANTHANOIDŮ**

P. BĚLINA, V. VOJTOVÁ, P. ŠULCOVÁ

*Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10, Pardubice*Korešpondenční autor: [petr.belina@upce.cz](mailto:petr.belina@upce.cz)

V rámci tohoto projektu byly syntetizovány podvojně orthofosforečnany lanthanoidů obecného vzorce  $\text{La}_x\text{Ln}_{1-x}\text{PO}_4$ , kde Ln = Nd nebo Pr a  $x = 0; 0,25; 0,5; 0,75$  a 1. Byly ověřeny podmínky syntézy těchto sloučenin jednak srážením z roztoku kyseliny fosforečné a oxidů příslušných lanthanoidů a také reakcí v pevné fázi z fosforečnanu diamonného a oxidů příslušných lanthanoidů. U připravených sloučenin byly stanoveny jejich fyzikálně-chemické vlastnosti (hustota, distribuce velikosti částic, olejové číslo atd.) s ohledem na jejich možné uplatnění jako anorganických antikoročních pigmentů. Dále byly také s připravenými vzorky provedeny předběžné antikoroční testy. Bylo sledováno pH a vodivost vodných výluhů (10% suspenze) připravených sloučenin a dále pak pH a vodivost vodných výluhů s ocelovými plíšky. U ocelových plíšků byly sledovány jejich změny vlivem koroze (hmotnostní úbytky) a vypočítány ukazatelé plošné koroze. Provedené testy prokázaly, že připravené pigmenty inhibují korozi reakce v porovnání se slepými vzorky (bez pigmentu). Výluhy vykazují slabě kyselé pH. V budoucnu budou tyto sloučeniny podrobeny kompletnímu testování jejich antikoročních vlastností včetně aplikace do nátěrových hmot.

*Tento projekt vznikl za podpory MŠMT ČR č. projektu 0021627501 a Grantové agentury ČR č. projektu 104/05/2081.*

**2Po-Po24****VLIV PŘÍDAVKU HALOGENIDŮ NA VLASTNOSTI SUPRAVODIVÉ FÁZE BI-2223**V. JAKEŠ<sup>1</sup>, D. SÝKOROVÁ<sup>2</sup>, O. SMRČKOVÁ<sup>2</sup><sup>1</sup>*VŠCHT Praha, Fakulta chemické technologie, Ústav anorganické chemie*<sup>2</sup>*Vysoká škola chemicko-technologická Praha*Korešpondenční autor: [vit.jakes@vscht.cz](mailto:vit.jakes@vscht.cz)

Systém Bi-Sr-Ca-Cu-O obsahuje levné a netoxické prvky, což z něho dělá slibný materiál pro technické aplikace. V tomto systému byly identifikovány tři supravodivé fáze obecné stechiometrie  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{2n+4}$ . S rostoucím  $n$  roste kritická teplota, pro  $n = 3$  je  $T_c = 110$  K. Polykrystalické objemové vzorky nemají dostatečně vysoké hodnoty kritických parametrů (např. proudové hustoty). Výzkum je proto zaměřen na jejich zlepšení a jednou z možností je substituce, případně adice dalších

prvků do vzorku.

V této práci byly reakcí v pevné fázi z příslušných oxidů, uhličitánů,  $\text{CaF}_2$  a  $\text{CaCl}_2$  připraveny vzorky nominálního složení  $\text{Bi}_{1,6}\text{Pb}_{0,4}\text{Sr}_2\text{Ca}_{2,5}\text{Cu}_{3,5}\text{O}_{x-y}\text{F}_y$  a  $\text{Bi}_{1,6}\text{Pb}_{0,4}\text{Sr}_2\text{Ca}_{2,5}\text{Cu}_{3,5}\text{O}_{x-y}\text{Cl}_y$  ( $y = 0,0; 0,3; 0,6; 0,9$ ). Tyto vzorky byly charakterizovány měřením kritické proudové hustoty, teplotní závislosti elektrického odporu a magnetické susceptibility. Fázové složení bylo určeno pomocí RTG fázové analýzy.

*Tato práce byla podpořena GA ČR jako projekt číslo 203/05/0114 a MŠMT jako projekt číslo 604 613 73/02*

**2Po-Po25****BAREVNÉ VLASTNOSTI SLOUČENIN TYPU  $\text{Ce}_{0,95}\text{Ln}_{0,05}\text{O}_2$** 

L. VITÁSKOVÁ, P. ŠULCOVÁ

*Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10, Pardubice*Korešpondenční autor: [lucievitaskova@volny.cz](mailto:lucievitaskova@volny.cz)

V dnešní době se výzkum speciálních anorganických pigmentů pro keramiku zaměřuje hlavně na jejich ekologickou nezávadnost. Je zde snaha nahradit toxické prvky (především Pb, Hg, Cd, Cr) v pigmentech prvky, které by měly příznivý dopad na životní prostředí a zároveň, aby tyto nové sloučeniny měly vysokou termickou stabilitu a chemickou odolnost. Pigmenty na bázi  $\text{CeO}_2$  byly připraveny klasickým suchým způsobem. Reakční směsi byly vypáleny v elektrické superkanthalové peci (typ 0517S; CLASIC CZ, s.r.o., Řevnice, ČR) při teplotách 1400, 1500 a 1600 °C po dobu 1 hodiny. U získaných pigmentů byl sledován vliv jednotlivých lanthanoidů (Tb, Ho, Dy, Yb, Y, Lu, Tm, Sm, Gd, Nd a La) na konečné vybarvení pigmentů v organickém pojivu a v keramické glazuře G 05091 (Glazura, s.r.o. Roudnice nad Labem). Výsledky barevných vlastností pigmentů byly získány pomocí přístroje ColorQuest XE (HunterLab, USA), kde byl použit barevný prostor CIELAB s barevnými souřadnicemi  $L^*$ ,  $a^*$ ,  $b^*$  [1]. Dále byly barevné vlastnosti popsány mírou sytosti  $S$  ( $S = [(a^*)^2 + (b^*)^2]^{1/2}$ ) a barevným tónem  $H^\circ$  ( $H^\circ = \arctg(b^*/a^*)$ ). Tento výzkum je podporován Grantovou agenturou ČR (104/05/2081).

[1] Šulcová P., Vlastnosti anorganických pigmentů a metody jejich hodnocení, Pardubice 2000

**2Po-Po26****BAREVNÉ VLASTNOSTI SLOUČENIN TYPU  $(\text{Bi}_2\text{O}_3)_{1-x}(\text{Sm}_2\text{O}_3)_x$** E. PROKLEŠKOVÁ<sup>1</sup>, P. ŠULCOVÁ<sup>1</sup>, P. MOŠNER<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10, Pardubice

<sup>2</sup>Katedra obecné a anorganické chemie, Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická

Korešpondenční autor: *eva.prokleskova@student.upce.cz*

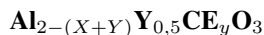
Za nejuniverzálnější anorganické pigmenty s oranžovými a žlutými odstíny byly ještě donedávna pokládány chromové oranže a žlutě, jejichž základem jsou z chemického hlediska chromany olovnaté. Jejich hlavní nevýhodou je však toxicita podmíněná přítomností olova a šestimocného chromu. V současné době jsou tedy na katedře anorganické technologie Univerzity Pardubice hledány nové anorganické pigmenty, které eliminují použití těžkých kovů, a jenž by svojí barevností i ostatními pigmentovými vlastnostmi zmíněné oranžové a žluté pigmenty nahradily [1]. Cílem této práce bylo zhodnotit barevné možnosti sloučenin na bázi Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, konkrétně (Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)<sub>1-x</sub>(Sm<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)<sub>x</sub>, kde x = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5. Pigmenty byly připravovány klasickým suchým způsobem a kalcinovány při teplotách 700, 750, 800 a 850 °C. Byl sledován vliv obsahu samaria a teploty výpalu na barevné vlastnosti pigmentů, a dále pak u barevně nejzajímavějšího pigmentu vliv mletí a mineralizátorů na změnu jeho barevného odstínu. Jako mineralizátory byly použity: NaF, KCl, AlF<sub>3</sub>, MgF<sub>2</sub>, CaF<sub>2</sub>, Na<sub>2</sub>SiF<sub>6</sub> a Na<sub>3</sub>AlF<sub>6</sub>, a to v množství 5 hmot.%. Pigmenty s mineralizátory pak byly vypáleny při teplotách 700, 750, 800 a 850 °C. Všechny připravené pigmenty byly aplikovány do organického pojivového systému (Balakom, a.s.), a tyto aplikace byly objektivně hodnoceny pomocí barevných souřadnic systému CIE L\*a\*b\*. Měření barevnosti bylo provedeno pomocí spektrofotometru ColorQuest XE (HunterLab, USA) [2]. Tato práce je realizována za finanční podpory GAČR (104/05/2081) a MŠMT (0021627501)

[1] ŠULCOVÁ P., JURČÍKOVÁ D., VOŽENÍLKOVÁ J., TROJAN M.: Pigmenty na bázi Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Sb. konf. „Nové trendy v anorganické technologii 2005“, 26.5. - 27.5.2005, Praha, str. 134-141.

[2] ŠULCOVÁ P.: Vlastnosti anorganických pigmentů a metody jejich hodnocení, 1. vydání, Pardubice 2000.

## 2Po-Po27

### VLIV MINERALIZÁTORU NA BAREVNÉ VLASTNOSTI PIGMENTŮ TYPU



L. VÁLEK

Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10, Pardubice

Korešpondenční autor: *lukasvalek@email.cz*

Sloučeniny typu  $\text{Al}_{2-(x+y)}\text{Y}_x\text{Ln}_y\text{O}_3$  se strukturou perovskitu (CaTiO<sub>3</sub>) byly intenzívně sledovány z hlediska

jejich použití jako speciální anorganické pigmenty s vysokou chemickou odolností, termickou stabilitou a ekologickou nezávadností pro vybarvování keramických glazur a smaltů.

Byl sledován vliv vybraných mineralizátorů - H<sub>3</sub>BO<sub>3</sub>, Li<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, NaCl a Na<sub>2</sub>SiF<sub>6</sub> v množství 5 hm. % na barevné vlastnosti připravených pigmentů typu

$\text{Al}_{2-(x+y)}\text{Y}_{0,5}\text{Ce}_y\text{O}_3$  (y = 0.1, 0.3 a 0.5). Pigmenty byly připraveny klasickým suchým způsobem syntézy, který spočívá v homogenizaci výchozích surovin (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, CeO<sub>2</sub>, mineralizátor) v třecí misce tloučkem a následné kalcinaci v elektrické peci při teplotách 1300, 1350, 1400 a 1450 °C po dobu jedné hodiny. Připravené pigmenty byly aplikovány do organického pojivového systému v plném tónu na bílý lesknoucí neabsorbující papír. Barevné vlastnosti byly měřeny pomocí spektrofotometru ColorQuest XE (HunterLab, USA) v systému barevných souřadnic CIE L\*a\*b\* (1976).

U pigmentů s nejlepšími barevnými vlastnostmi byl dále hodnocen vliv mineralizátoru na velikost pigmentových částic. Střední velikost částic d<sub>50</sub> byla měřena na přístroji Mastersizer 2000 MU.

Tento výzkum je podporován grantovou agenturou ČR (104/05/2081).

## 2Po-Po28

### SYNTÉZA A STUDIUM HEXAIZOTHIOKYANATOCHROMITANŮ MĚDNATÝCH S VYBRANÝMI N-DONOROVÝMI LIGANDY

K. KUTLÁKOVÁ<sup>1</sup>, Z. SMÉKAL<sup>2</sup>, Z. ŠINDELÁŘ<sup>2</sup>, P. ŠTARHA<sup>2</sup>, J. KAMENÍČEK<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Přírodovědecká fakulta, UP Olomouc, Katedra anorganické chemie

<sup>2</sup>Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, Křížkovského 10, 771 47 Olomouc

Korešpondenční autor: *katerina.kutlakova@email.cz*

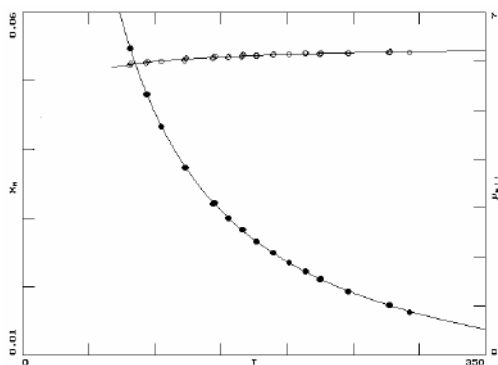
V rámci systematického studia koordinačních sloučenin, které obsahují paramagnetické atomy mědi(II) můstkované různými komplexními anionty např. [Ni(CN)<sub>4</sub>]<sup>2-</sup> (cit.<sup>1</sup>), [Pd(CN)<sub>4</sub>]<sup>2-</sup> a [Pt(CN)<sub>4</sub>]<sup>2-</sup> (cit.<sup>2</sup>), [Co(CN)<sub>6</sub>]<sup>3-</sup> a [Cr(CN)<sub>6</sub>]<sup>3-</sup> (cit.<sup>3</sup>), jsme se zaměřili na přípravu a studium nových, méně častých, hexaizothiokyanatochromitanů měďnatých s vybranými bidentátními, tridentátními a tetradentátními N-ligandy. Koordinační sloučeniny tohoto typu slouží jako iontoměniče, molekulová síta a prekurzory nanočástic, tenkých vrstev a bimetalických katalyzátorů.

Reakcí výchozího K<sub>3</sub>[Cr(NCS)<sub>6</sub>]·4H<sub>2</sub>O s Cu(ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>·6H<sub>2</sub>O v přítomnosti polydentátních aminů

ve vodném prostředí byly připraveny nové sloučeniny o složení  $[\text{Cu}(\text{L})_3][\text{Cr}(\text{NCS})_6]_2 \cdot x\text{H}_2\text{O}$  {L = tridentátní medpt (*N,N*-bis-(3-aminopropyl)methylamin) a ept (*N*-(2-aminoethyl)-1,3-propandiamin) nebo tetradentátní hatco (1,3,6,9,11,14-hexaazatricklo[12,2,1,1<sup>6,9</sup>]oktadekan) a hatce (1,3,6,10,12,15-hexaazatricklo[13,3,1,1<sup>6,10</sup>]ikosan)}, dále pak  $[\text{Cu}(\text{L})_2][\text{Cr}(\text{NCS})_6]\text{ClO}_4 \cdot x\text{H}_2\text{O}$  {L = bidentátní aep (2-(2-aminoethyl)-pyridin) a amp (2-(aminomethyl)-pyridin)}.

Tyto komplexní sloučeniny byly charakterizovány na základě chemické analýzy prvků (C, H, N), elektronových a infračervených spekter a měření magnetické susceptibility za pokojové teploty. U sloučenin s ligandy medpt, hatco a hatce byla provedena termická analýza (TG a DTA), která potvrdila přítomnost molekul krystalové vody. V případě komplexu s medpt byla rovněž změřena teplotní závislost magnetické susceptibility do 80 K - sloučenina se v tomto teplotním intervalu chová jako látka magneticky zředěná.

- [1] Z. Smékal, Z. Trávníček, J. Mroziňský, J. Marek: *Inorg. Chem. Commun.* 6 (2003), 1395-1399.
- [2] Z. Smékal, K. Kutláková, Z. Šindelář, J. Kameníček: *Acta Univ. Palacki. Olomuc. Fac. Rer. Nat., Chem.* 45 (2006), 45-53.
- [3] K. Kutláková, Z. Smékal, Z. Trávníček, J. Kameníček, Z. Šindelář: *Pokroky v anorganické chemii, Sborník příspěvků z VI. semináře* (2006), 33.



Teplotní závislost molární susceptibility ( $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ ) ( $\hat{\chi}_m$ ) a efektivního magnetického momentu (BM) ( $\hat{\mu}_{\text{eff}}$ ) pro  $[\text{Cu}(\text{medpt})_3][\text{Cr}(\text{NCS})_6]_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$

## 2Po-Po29

### VLIV VÝCHOZÍCH SUROVIN NA FYZIKÁLNĚ-CHEMICKÉ VLASTNOSTI $\text{CaTiO}_3$

J. LUXOVÁ, P. ŠULCOVÁ, M. TROJAN

*Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10, Pardubice*

Korešpondenční autor: *jana.luxova@upce.cz*

Keramické materiály na bázi perovskitů jsou pro své výborné magnetické a elektrické vlastnosti známy dlouhou řadu let. Perovskitové sloučeniny mají obecný vzorec  $\text{ABX}_3$  a jsou odvozeny od v přírodě normálně vyskytujícího se minerálu perovskitu  $\text{CaTiO}_3$ . Barva tohoto minerálu se pohybuje v různých odstínech, od černé přes hnědou až po žlutou či oranžovou. Největší zastoupení mají perovskity s obsahem kyslíku či fluoridu, ale existují i perovskitové sloučeniny ve formě sulfidů, kyanidů, oxyfluoridů, atd. [1]. Dlouhodobý výzkum našeho pracoviště je zaměřen na hledání náhrady za toxické anorganické pigmenty, které jsou z hygienicko-ekologického hlediska dnes nepoužitelné [2]. Perovskity by proto mohly hrát velkou úlohu jako možná náhrada některých anorganických pigmentů.

V rámci této práce byl posuzován vliv výchozích titanových surovin na fyzikálně-chemické vlastnosti perovskitové sloučeniny  $\text{CaTiO}_3$ . Jako výchozí suroviny  $\text{Ti}^{4+}$  byly pro srovnání použity  $\text{TiO}_2$  (anatas),  $\text{TiOSO}_4$  a  $\text{Na}_2\text{Ti}_4\text{O}_9$  a v případě kationtu  $\text{Ca}^{2+}$  byl použit  $\text{CaCO}_3$ . Výchozí suroviny byly po zhomogenizování kalcinovány při teplotách 1000, 1100 a 1200 °C s výdrží 3 hodiny na maximální teplotě. Po kalcinaci následovala klasická úprava spočívající v promytí výpalků horkou destilovanou vodou z důvodu odstranění vodorozpuštěných látek.

Hlavním cílem této práce bylo posoudit vliv použitých surovin na fyzikální a chemické vlastnosti testovaného perovskitu. Za tímto účelem byly stanoveny jeho specifické hmotnosti, hodnoty pH a rezistivity vodných výluhů, barevné vlastnosti, strukturální vlastnosti a dále byly posuzovány jeho korozně-inhibiční vlastnosti. K tomuto účelu bylo využito gravimetrického stanovení úbytku ocelových plíšků, které byly vystaveny působení prostředí tvořeného 10 % suspenzí připraveného pigmentu v redestilované vodě.

*Tato práce byla podporována projektem MSM č. 0021627501.*

- [1] Muller O., Roy R.: *The Major Ternary Structural Families*, Springer, New York\_Heidelberg\_Berlin, 1975.
- [2] Trojan M., Šolc Z., Novotný M.: *Pigments*, Kirk-Othmer Encyclopedia of Inorganic Technology, Vol. 19, J. Wiley and Sons Inc. New York 1996.

**2Po-Po30****VLASTNOSTI A STRUKTURA SKEL SYSTÉMU  
Li<sub>2</sub>O-PbO-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>**J. JIRÁK<sup>1</sup>, L. KOUDELKA<sup>2</sup>, J. ŠUBČÍK<sup>2</sup><sup>1</sup>Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická<sup>2</sup>Katedra obecné a anorganické chemie, Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická

Korešpondenčný autor: josef.jirak@upce.cz

K méně běžným typům anorganických skel patří skla fosforečnanová a zejména borofosforečnanová. Lihtná skla nalézají v poslední době uplatnění například jako tuhé elektrolyty, olovnatá a zinečnatá skla jako záta-  
vové materiály a smalty. Předmětem této práce bylo studium skel systému Li<sub>2</sub>O-PbO-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> syntetizovaných reakcí Li<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, PbO, H<sub>3</sub>BO<sub>3</sub> a H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> v Pt kelímku při teplotách 1100-1200°C a následným pomalým chladnutím na vzduchu. Skla byla studována ve třech kompozičních řadách xLi<sub>2</sub>O-(50-x)PbO-50P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, xLi<sub>2</sub>O-(50-x)PbO-10B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-40P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> a xLi<sub>2</sub>O-(50-x)PbO-20B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-30P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>.

Charakterizace připravených skel byla provedena měřeními základních fyzikálních parametrů - měrné hmotnosti, měrného objemu a stanovením teploty skelného přechodu v závislosti na vzrůstajícím obsahu Li<sub>2</sub>O. Při záměně Li<sub>2</sub>O za PbO ve všech třech kompozičních řadách klesají hodnoty měrné hmotnosti i molárního objemu studovaných skel. Závislosti hodnot transformací teploty, T<sub>g</sub>, vykazují minima při obsahu přibližně 30 mol% Li<sub>2</sub>O, která jsou podobná borátové anomálii. Podle kritéria stability T<sub>c</sub>-T<sub>g</sub> je termicky nejstabilnější sklo o složení 10Li<sub>2</sub>O-40PbO-10B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-40P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>. Z křivek diferenční termické analýzy bylo zjištěno, že všechna skla při zahřívání krystalizují v rozmezí teplot 362-502 °C.

Ramanova spektra připravených skel odrážejí v kompozičních řadách změny v počtu jednotlivých elementárních strukturních celků. V práci je diskutováno přiřazení nalezených spektrálních pásů. V borofosfátových sklech s vysokým obsahem Li<sub>2</sub>O dochází k výraznější reorganizaci strukturní sítě a posuvu v poměru strukturních celků typu Q<sup>2</sup>/Q<sup>1</sup> ve prospěch strukturních celků typu Q<sup>2</sup>, přičemž roste propojení mezi borátovými a fosfátovými celky můstky B-O-P.

Tato práce vznikla za finanční podpory Ministerstva školství ČR (výzkumný projekt č. 002162750) a Grantové agentury ČR (grant č. 104/07/0315).

**2Po-Po31****PHOTOCATALYTIC ACTIVITY OF TiO<sub>2</sub> THICK FILMS DEPOSITED ON Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> CERAMIC FOAMS**M. GORBÁR<sup>1</sup>, M. VARGOVÁ<sup>2</sup>, G. PLESCH<sup>1</sup>, U.F. VOGT<sup>3</sup>, K. JESENÁK<sup>1</sup>, M. MIKULA<sup>4</sup><sup>1</sup>Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta<sup>2</sup>Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra anorganickej chémie<sup>3</sup>Empa, Swiss Federal Laboratories for Materials, Dübendorf<sup>4</sup>Slovenská technická univerzita, Fakulta Chemickej a Potravinárskej technológie, Radlinského 9, Bratislava, 812 37

Korešpondenčný autor: plesch@fns.uniba.sk

Open-cell ceramic foams provide an interesting combination of properties, such as high porosity, low weight, high temperature stability, high permeability, low thermal conductivity and low heat capacity. These properties have led to a diverse field of applications, including catalyst support, metal melt filtration, porous burners or diesel soot traps. In this work the use of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> foams as substrates for thick films of TiO<sub>2</sub> photocatalyst is reported. The ceramic foam substrates were synthesized by the “Schwartzwalder” replica method. Presintered porous foams with a pore distribution of 15, 20 and 25 ppi (ppi = pores per inch) were coated with TiO<sub>2</sub> aqueous slurries by dip-coating technique and annealed at 600°C. For the preparation of slurries, titania nanopowder P25 (Degussa) was used. Crack free films, which showed a thickness in the range of 5 - 15 μm were obtained, depending on the number of coating cycles. The photocatalytic activity was investigated by determination of total organic carbon (TOC) in the process of degradation of aqueous phenol solution. The deposition of the TiO<sub>2</sub> powder on the surface of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> foam increases its activity, which is expressed as the amount of photodecomposed phenol per mg of catalyst. The highest activity shows the Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> foam with the highest pore size (15 ppi) covered by TiO<sub>2</sub>.

*Acknowledgement:*

The authors wish to thank to Science and Technology Assistance Agency Slovakia (APVV) - project APVT-20-0011804 for financial support



**2Po-Po32****THE EFFECT OF SELECTED SANDSTONE MINERALOGICAL COMPOSITION ON FINAL THERMAL EXPANSION**

E. PLEVOVÁ, L. VACULÍKOVÁ, V. ŠUGÁRKOVÁ

*Ústav geoniky AV ČR, v.v.i.*Korešpondenčný autor: *plevova@ugn.cas.cz*

The effect of temperature on the resultant rock properties seems to be a quite difficult problem significantly effected by rock composition and structure. Temperature increase causes the phase and polymorphic transformation connected to thermal expansion with following appearance of tensions and cracks in minerals and rock structure. After consequential temperature decrease, developed tensions and cracks still influence the process. The effect of temperature on the final rock properties depends not only on structure and texture as well as spatial orientation but also on mineralogical composition. Differences in mineralogical composition cause different thermal behaviour of rock in consequence of various chemical reactions (dehydration, dehydroxylation, dissociation etc.) and phase and polymorphic transformations. Simultaneous thermogravimetry and differential thermal analysis highly reflect such chemical reactions and phase/polymorphic transformation. The proposed work was aimed at examination of effect of rock composition on final thermal expansion and effect of proceeding phase transformation during heat stress of material. Thermal measurement was performed under accurately defined conditions by thermomechanical analysis. Mineralogical composition was estimated by thermal analysis and infrared spectroscopy. Obtained data summarized differences in thermal expansion depending on different sandstone mineralogical composition and interpreted various sandstone thermal behaviour. Next studies based on using X-ray diffraction is necessary. Studies on the above points are being done and the results will be published elsewhere.

*This project has been supported by the Grant Agency of the Czech Republic, and designated: Grant Project No. 105/07/P416*

- [1] RAWLEY, R.K. Mineralogical investigation on an Indian glauconitic sandstone of Madhya Pradesh state. *Applied Clay Science*, 1994, 8, p. 449 - 465
- [2] BATTAGLIA, S., FRANZINI, M., MANGO, F. High-sensitivity apparatus for measuring linear thermal expansion: preliminary results on the response of marbles to thermal cycles. *Nuovo Cimento C*, 1993, vol.16C, ser.1, no.4, p.453-461
- [3] RUTTER, R.H., HADIZADEH, J. On the influence of porosity on the low-temperature brittle—ductile transition in siliciclastic rocks. *Journal of Structural Geology*, 1991, 13 (5), p. 609 - 614

**2Po-Po33****THE ELECTROCHEMICAL BEHAVIOUR OF LANTHANUM FLUORIDE IN MOLTEN ALKALI FLUORIDES**

M. AMBROVÁ, V. DANIELIK, J. JURÍŠOVÁ

*Slovenská Technická Univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov*Korešpondenčný autor: *marta.ambrova@stuba.sk*

The electrochemical behaviour of lanthanum fluoride in molten LiF and eutectic (LiF-CaF<sub>2</sub>) melt was investigated by cyclic voltammetry. The experiments were carried out at the temperatures of 900 °C and 800 °C, respectively, in graphite crucible which served also as a counter electrode. Several types of working electrodes (Mo, W, Ni and Cu) were used. Tantalum was used as a reference electrode. Laboratory electrolysis was carried out in the system LiF-CaF<sub>2</sub>-La<sub>2</sub>F<sub>3</sub> at the temperature of 800 °C in galvanostatic ( $j = 0.21 \text{ A}\cdot\text{cm}^{-2}$ ) and potentiostatic ( $E = 0.87 \text{ V}$ ) regimes. In both cases nickel served as a cathode and graphite as an anode. Experiments were carried out in argon atmosphere; the time of electrolysis was 90 min. Surface of the cathode was investigated by X-ray microanalysis.

It was found that no new reduction peak occurred on the molybdenum or tungsten electrodes in the investigated systems. This means that no reduction of La (III) takes place on these electrodes. On the other hand, when copper or nickel electrodes were used, new peaks corresponding to the reduction of La (III) to metal lanthanum appeared. This can be explained by formation of alloys or intermetallic compounds of lanthanum with copper or nickel. On the basis of data obtained in galvanostatic regime and results obtained by X-ray microanalysis it was found that lanthanum was electrodeposited together with calcium under formation of intermetallic compounds with the electrode materials. However, in potentiostatic regime mainly lanthanum was deposited, which enables its separation.

*This work was supported by Science and Technology Assistance Agency under the contract No. APVT-20-000204.*

**2Po-Po34****PRÍPRAVA A VLASTNOSTI OLOVNATÉHO KRIŠTÁLU S OBSAHOM FILTROVÉHO PRACHU**

G. RUDINSKÁ, D. ONDRUŠOVÁ, M. PAJTÁŠOVÁ

*Fakulta priemyselných technológií TnUAD, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov*Korešpondenčný autor: *rudinskag@fpt.tnuni.sk*

Neustále zvyšujúce sa požiadavky na zníženie environ-

mentálnych dopadov priemyselnej výroby nútia priemysel hľadať a používať modernejšie výrobné postupy a technológie, lepšie zabezpečovať výrobný proces z hľadiska úniku znečisťujúcich látok do životného prostredia. Prezentovaná práca sa zameriava na posúdenie možnosti eliminovať filterný prach - úlet, zachytávaný na komínovom filtri, zaradením ako ďalšej vstupnej suroviny vo výrobe olovnatého skla. Jeho využitie by prinieslo zníženie množstva sklárskej suroviny - austroxu a nie malú finančnú úsporu spojenú s následným znížením finančných prostriedkov vynakladaných na likvidáciu filterného prachu. Bolo pripravených šesť vzoriek skiel s prídavkom filterného prachu 0 - 1,5 hmot.% a ako referenčná vzorka skla bolo použité sklo bez prídavku filterného prachu. Ako kritériá pre posúdenie vplyvu prídavku filterného prachu na vlastnosti skla a kvalitu vzoriek skiel boli zvolené vlastnosti - hustota, index lomu a chemická odolnosť skla - normová skúška ČSN ISO 719. Z nameraných hodnôt indexu lomu a hustoty pre vzorky skla s prídavkom filterného prachu neboli zistené výraznejšie odchýlky od referenčnej vzorky skla. Všetky vzorky skiel - referenčná aj s prídavkom filterného prachu patrili do rovnakej hydrolytickej odolnosti stanovenej normou ČSN ISO 719. Z dosiahnutých výsledkov možno konštatovať možnosť využitia filterného prachu v procese výroby olovnatého skla s obsahom 24 hmot.% PbO.

Práca vznikla s podporou grantovej agentúry MŠ SR KEGA č. 3/3230/05 a VEGA č. 1/3161/06

## Postery – sekcia 3

### 3Po-Po1

#### PŘÍPRAVA MULTIVALENTNÍCH DERIVÁTŮ ELLIPTICINU

P. BAŠOVÁ<sup>1</sup>, K. KŘENEK<sup>1</sup>, R. GAŽÁK<sup>1</sup>, K. BEZOUŠKA<sup>2</sup>, V. KŘEN<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Laboratoř biotransformací, Mikrobiologický ústav AV ČR, v.v.i

<sup>2</sup>Laboratoř architektury proteinů, Mikrobiologický ústav AV ČR, v.v.i

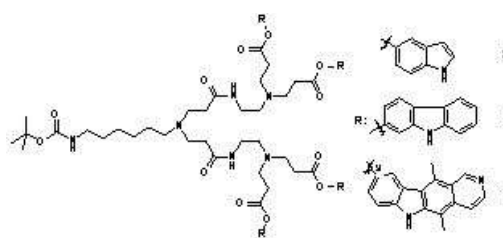
Korešpondenčný autor: [basova.petra@gmail.com](mailto:basova.petra@gmail.com)

Ellipticin (**1**) je cytostatikum, jehož deriváty jsou již v I. a II. fázi klinických testů. Převládajícími mechanismy protinádorového účinku jsou i) interkalace do dvojšroubovicové struktury DNA, ii) inhibice topoizomerázy II a iii) selektivní inhibice fosforylace proteinu p53. Výhodou ellipticinu je jeho vysoká účinnost a poměrně nízká toxicita. Hematologická toxicita je prakticky nulová. Díky provedeným SAR studiím je nyní možné jeho strukturu dále optimalizovat. U multivalentních molekul nesoucích jako ligandy ellipticin, je předpokládán podstatně vyšší

účinek (afinita k DNA).

Tato studie se zabývá přípravou PAMAM dendrimerů 1. a 2. generace a jeho konjugátů se strukturálními analogy 9-hydroxyellipticinu - 5-hydroxyindolem (**3**) a 2-hydroxykarbazolem (**2**) a přípravou 9-hydroxyellipticinu jako ligandu pro konjugaci s možností dalšího navázání celého konjugátu na proteiny. Hydroxylace ellipticinu v poloze C-9 snižuje jeho biologické účinky (dokonce zvyšuje), proto je možné tuto skupinu použít s výhodou pro konjugaci.

Tato práce byla podpořena granty GA AVČR IAA400200503, MŠMT OC136 a IM 4635608802, LC 06010



Dendrimer 2. generace se strukturálními analogy 9-hydroxyellipticinu - 5-hydroxyindolem (**3**) a 2-hydroxykarbazolem (**2**)

### 3Po-Po2

#### TARGETING OF ABASIC SITE IN DNA BY PYRENE FUNCTIONALIZED LNA

K. BUCHALOVÁ<sup>1</sup>, J. WENGEL<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Zentiva a.s.

<sup>2</sup>Nucleic Acid Center, Syddansk Universitet, Campusvej 55, 5230 Odense

Korešpondenčný autor: [katerina.buchalova@zentiva.cz](mailto:katerina.buchalova@zentiva.cz)

Nucleosides having their nucleobase replaced by a pyrene moiety have been exploited mainly as universal bases or used for a recognition of abasic sites (F) in target oligonucleotides (ONs). Locked Nucleic Acid (LNA)<sup>1,2</sup> is known for unprecedented binding ability and Watson-Crick discrimination when hybridized with complementary DNA or RNA. Based on our recent experiences<sup>3</sup> we developed a new monomer X bearing two pyrene motifs. Having two pyrene units close to each other, a potential excimer band formation can be expected. This gives a chance to get some reasonable differences between fluorescence emission spectra of an unhybridized probe and a probe upon hybridization target DNA with / without an abasic site.

A new *N,N*-bis(pyrenemethylene)aminomethyl C-glycoside (Fig. 1) with a conformationally locked scaffold was synthesized and incorporated into ON

9-mer and 14-mer sequences to target DNA. Placing any natural nucleobase opposite to an abasic site resulted in a large decrease of the ON duplex stability. However, when the natural nucleobase was replaced by the monomer **X**, only a slight decrease in thermal stability in comparison to a natural A-T basepair occurred. Multiple incorporation of the monomer **X** and **F** as four consecutive **X-F** “base-pairs” in 14-mer dsON lead to a large stabilization compare to a natural 14-mer ON, which may be advantageous for building more complex systems within the field of nanotechnology.

*The Danish National Research Foundation is gratefully acknowledged for funding Nucleic Acid Center.*

*This work was supported by Sixth Frame Programme Marie Curie Host Fellowship for Early Stage Research Training under contract number MEST-CT-2004-504018.*

- [1] Koshkin A.A., Singh S. K., Nielsen P., Rajwanashi V. K., Kumar R., Meldgaard M., Olsen C. E. and J. Wengel.: *Tetrahedron* 1998, 54, 3607.
- [2] Obika S., Nanbu D., Hari Y., Andoh J.-I., Morio K.-I., Doi T. and Imanishi T.: *Tetrahedron Letters* 1998, 39, 5401.
- [3] Vehagen C., Bryld T., Raunkjær M., Vogel S., Buchalová K. and Wengel J.: *Eur. J. Org. Chem* 2006, 2538.

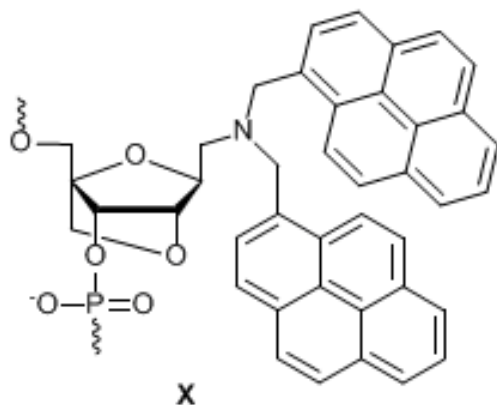


Fig. 1

### 3Po-Po3

#### NOVEL APPLICATION OF SUBSTITUTED ALLENYLOXIMES IN SYNTHESIS OF HETEROCYCLIC COMPOUNDS

M. BUCHLOVIČ, S. MAN, M. POTÁČEK

*Masarykova univerzita, Přírodovědecká fakulta, Ústav chemie*

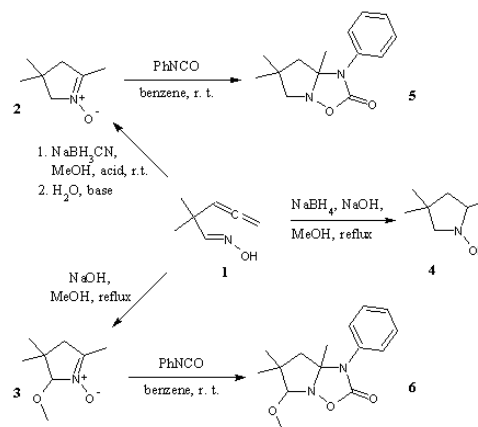
Korešpondenčný autor: buchlo@centrum.sk

A new ways of substituted allenylloxime cyclization reactions were examined. For the starting compound **1** (2,2-dimethylpenta-3,4-dienal oxime) we have applied three various conditions, which afforded different 5-membered heterocyclic products.<sup>1</sup> Till now such a cyclization, leading to 5-membered ring, has not been observed.<sup>2,3</sup>

All reactions were carried out in methanol. Cyclization of the allenylloxime **1** can be performed under reductive conditions using  $\text{NaBH}_3\text{CN}$  or  $\text{NaBH}_4$  leading to compounds **2** and **4**, respectively. Any absence of reductive agent under base catalysis is leading to methoxy-substituted compound **3**.

Moreover, two products possess dipolar structure and are classified as a cyclic nitrones (compounds **2** and **3**). Nitrones **2** and **3** showed expected reactivity against dipolarophile ( $\text{PhNCO}$ ) in 1,3-dipolar cycloaddition. Their structures were confirmed by consequent X-ray analysis of formed bicyclic products **5,6**.

- [1] Man S., Buchlovič M., Potáček M.: *Tetrahedron Lett.* 2006, 47, 6961.
- [2] Grimaldi J., Cormons A.: *Tetrahedron Lett* 1985, 26, 825.
- [3] Grimaldi J., Cormons A.: *C. R. Acad. Sci. Paris* 1989, 308(18), 1753.



### 3Po-Po4

#### VYUŽITIE CHIRÁLNYCH ELEKTRÓNAKCEPTÓRNYCH SKUPÍN PRI SYNTÉZE OXINDOLOVÉHO FYTOALEXÍNU (S)-(-)-SPIROBRASINÍNU

M. BUDOVSKÁ, P. KUTSCHY, Z. ČURILLOVÁ

*Univerzita P. J. Šafárika, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Katedra organickej chémie, Moyzesova 11, 040 01 Košice*

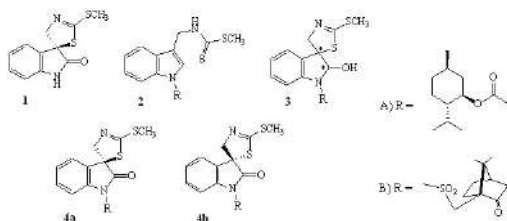
Korešpondenčný autor: mariana.budovska@post.sk

Indolové fytoalexíny produkované rastlinami čeľade kapustovité (*Cruciferae*) majú významnú úlohu pri obrane rastlín pred vonkajšími vplyvmi a niektoré vykazujú antimikrobiálnu, kanceroprotektívnu a protinádorovú účinnosť. Možnosti preskúmať biologické vlastnosti prírodných látok sú podmienené ich dostupnosťou. Izolácia indolových fytoalexínov z rastlín je komplikovaná, pretože sú prítomné len v malých množstvách a v zmesi s veľkým počtom iných zlúčenín. Preto je nevyhnutné vyvíjať syntézy vedúce k týmto látkam v množstvách umožňujúcich skúmanie ich biologickej aktivity.<sup>1</sup>

V tejto práci bola preskúmaná možnosť využitia derivátov brasinínu, ktoré majú na indolovom dusíku naviazanú chirálnu elektrónakceptorú skupinu, pri syntéze prírodného (*S*)-(-)-spirobrasinínu (**1**) ako aj jeho neprírodného enantioméru. Princíp navrhutej syntézy je založený na spirocyklizácii 1-substituovaného brasinínu (**2**) s brómom v prítomnosti vody ako nukleofilu.<sup>2</sup> Výsledkom spirocyklizácie **2A** bol prednostný vznik *trans*-diastereoizomérov **3** a *cis*-diastereoizomérov **3** vznikali ako minoritné produkty. Pri spirocyklizácii **2B** vznikala zmes *cis*- a *trans*-diastereoizomérov **3**, ktoré nebolo možné separovať stĺpcovou chromatografiou, keďže vo všetkých skúmaných eluentoch mali rovnaké  $R_f$  hodnoty. Oxidácia *trans*-diastereoizomérov **3A** s PCC poskytla 1-substituované spirobrasiníny **4aA**, **4bA** v pomere 1:1, ktoré boli oddelené kryštalizáciou. Odstránením chirálnej pomocnej skupiny **A** sa získal (*S*)-(-)-spirobrasinín (**1**) a jeho enantiomér. Absolútna konfigurácia oboch enantiomérov spirobrasinínu bola potvrdená na základe už opísaných ECD spektier.<sup>3</sup>

Táto práca vznikla s podporou grantu VEGA, č. 1/3553/06

- [1] Pedras M. S. C., Zheng Q., Sarma -Mampillapalle V. K.: *Nat. Prod. Commun.* 2007, 2, 319.
- [2] Kutschy P., Suchý M., Monde K., Harada N., Marušková R., Čurillová Z., Dzurilla M., Miklošová M., Mezencev R., Mojžiš J.: *Tetrahedron Lett.* 2002, 43, 9489.
- [3] Suchý M., Kutschy P., Monde K., Goto H., Harada N., Takasugi M., Dzurilla M., Balentová E.: *J. Org. Chem.* 2001, 66, 3940.



### 3Po-Po5

#### 3,5-DIAMINO-4-PYRIDYLAZOPYRAZOLY, INHIBITORY CDK

P. CANKAŘ<sup>1</sup>, E. SCHÜTZNEROVÁ<sup>1</sup>, V. KRYŠTOF<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Katedra organické chemie, PřF UP v Olomouci, Tř. Svobody 8, 771 46 Olomouc

<sup>2</sup>Univerzita Palackého, Laboratoř růstových regulátorů

Korešpondenčný autor: [cankar@orgchem.upol.cz](mailto:cankar@orgchem.upol.cz)

Cyklin-dependentní kinasy (CDK) řídí důležité vnitrobuněčné procesy, jako je buněčný cyklus, transkripce či apoptóza. Díky své důležitosti v uvedených procesech se záhy staly významným cílem nových potenciálních chemoterapeutik cílených zvláště proti nádorovým onemocněním a některé z nich jsou již ve druhé fázi klinického testování. Dále se uvažuje o možných farmakologických aplikacích v oblasti inhibice replikace virů a zamezení množení některých buněčných parazitů.

V poslední době díky spolupráci Katedry organické chemie a Laboratoře růstových regulátorů bylo prokázáno, že 3,5-diamino-4-arylazopyrazoly vykazují inhibiční aktivitu na CDK. S překvapením bylo zjištěno, že tato skupina látek má jedinečnou afinitu k CDK9/cyklin T1 kinase, která je součástí transkripčního elongačního faktoru P-TEFb.

Na základě dřívějších výsledků<sup>1,2</sup> jsme se rozhodli připravit další deriváty 3,5-diamino-4-arylazopyrazolu, které jsou v poloze 4 substituovány heteroarylazo skupinou. Z předběžných výsledků testování biologické aktivity vyplynulo, že se podařilo připravit deriváty, které vykazují lepší inhibiční parametry.

Tato práce vznikla na základě finanční podpory MŠMT ČR v rámci výzkumného záměru MSM 6198959216.

- [1] Kryštof V., Cankar P., Fryšová I., Slouka J., Kontopidis G., Džubák P., Hajdúch M., Srovnal J., de Azevedo W.F. Jr., Orság M., Paprskářová M., Rolčík J., Látr A., Fischer P.M., Strnad M., *J. Med. Chem.*, 2006, 22, 6500-6509.
- [2] Cankar, P.; Fryšová, I.; Kryštof, V.; Lenobel, R.; Slouka, J.; Strnad, M.; Fisher, P. M., patent WO 2006024858 A1, 2006.

### 3Po-Po6

#### HUMAN PATHOGEN CANDIDA DUBLINIENSIS: A CELL WALL MANNAN WITH A HIGH CONTENT OF ALPHA-1,2-LINKED MANNOSE RESIDUES

I. LIŽIČÁROVÁ<sup>1</sup>, M. MATULOVÁ<sup>2</sup>, P. CAPEK<sup>1</sup>, E. MACHOVÁ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava

<sup>2</sup>Institute of Chemistry, Department of Glycomaterials, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava

Korešpondenčný autor: chemcape@savba.sk

A cell wall homopolymer - mannan has been isolated from the human pathogen yeast *Candida dubliniensis* CCY 29-177-1. It had  $M_w = 35\ 000$  and optical rotation  $[\alpha]^{20} = +48.1^{\circ}$ . First results, based on the compositional and methylation analyses and NMR spectroscopy studies on the *C. dubliniensis* mannan and its oligomeric acetolysis products pointed to a highly branched structure of the polymer [1]. The backbone, composed of  $\alpha$ -1,6-linked mannose residues, was found to be 83 % branched at O-2 by single mannose residues as well as oligosaccharide side chains mostly in the form of tri-, di-, mono- and tetramers. Longer side chains, penta- to heptamers, were present in lesser amounts. NMR spectra of oligosaccharides showed that they were formed mostly by  $\alpha$ -1,2- and  $\alpha$ -1,3-linked mannose residues. NMR data indicate that some Man residues of the backbone might be substituted at O-3. The presence of higher quantity of oligosaccharides with terminal  $\text{Man}\beta(1\rightarrow2)\text{Man}\beta(1\rightarrow)$  fragment was deduced on the basis of characteristic signals in the  $^1\text{H}$  and HSQC NMR spectra of the polymer.

In this study we describe the detailed analysis based on  $^1\text{H}$  and COSY NMR spectra of the mannan and its oligosaccharide fractions obtained after a conventional acetolysis. Trimers with  $\alpha$ -1,2-Man sequence were the most frequent side chains occurring in the polymer. Substitution of the backbone with single  $\beta$ Man was detected in an important quantity. Longer side chains (d.p. 5-7) were isolated in low quantity with higher content of  $\beta$ -1,2-linked Man units. Moreover, with increasing of their molecular weight the quantity of oligosaccharides with single  $\beta$ -, two consecutive  $\beta\beta$ - and three consecutive  $\beta\beta\beta$ -1,2-linked Man fragments was increasing and reaching maximum in M8 with 75 %. Although oligosaccharides containing  $\beta$ -1,2-linked Man did not survive completely the condition of the conventional acetolysis they afforded a valuable information on side chain structures occurred in *C. dubliniensis* mannan.

This work was supported by the Grant Agency of Slovak Academy of Sciences VEGA No. 2/7029/27, VEGA No. 2/5075/25, the Slovak State Programme Project No. 2003SP200280203, APVT 2/017304 and APVT 51-034504 grants.

- [1] Ližičárová, I.; Matulová, M.; Machová, E; Capek, P. Carbohydr. Polym., 2007, 68,191-195.

### 3Po-Po7

#### STEREOSELECTIVE SYNTHESIS AMINOSUGAR MOIETY OF SOME ANTIBIOTICS AND THEIR ANALOGUES

P. ČONKA, M. MARTINKOVÁ, J. GONDA

University of P. J. Šafárik, Faculty of Natural Science, Institute of Chemical Science, Department of Organic Chemistry

Korešpondenčný autor: patrik.conka@gmail.com

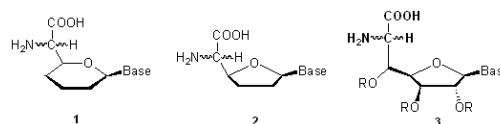
The C-glycopyranosylated<sup>[1]</sup> and C-glycofuranosylated<sup>[2]</sup>  $\alpha$ -amino acid substructures **1** and **2** are present in many natural products. Due to the high antibiotic and antifungal activities of these compounds has attracted much attention of synthetic chemists.

In this contribution diastereoselective introduction of the amino group at C-6 position of the glucose **3** by (3,3)-sigmatropic rearrangements of the corresponding allylic thiocyanates and trihalogenacetimidates under conventional conditions and also under microwave irradiation will be presented.

Syntheses generally start from a suitable protected and functionalized carbohydrate derivative.

The present work was supported by Grant Agency (No. 1/2472/05 and 1/3557/06) from the Ministry of Education, Research and development support agency (APVV 20-038405) Slovak republic and COST Action D32/011/05 Chemistry in High-Energy Microenvironments.

- [1] Goto, T.; Toya, Y.; Ohdi, T.; Kondo, T.; Tetrahedron Lett. 1982, 23 (12), 1271, Seto H., Koyama M., Ogino H., Tsuruoka T., Inouye S., Otake N.: Tetrahedron Lett. 24, 1805-1808 (1983).  
[2] Isono, K.; Asahi, K.; Sužuji, S. J. Am. Chem. Soc. 1969, 91, 7490, Isono, K.; Sužuji, S. Heterocycles 1979, 13, 333.



### 3Po-Po8

#### SYNTHESIS AND ANTIPROLIFERATIVE ACTIVITY OF HOMOANALOGUES OF SOME 1-METHOXYINDOLE PHYTOALEXINS

Z. ČURILLOVÁ<sup>1</sup>, P. KUTSCHY<sup>1</sup>, M. BUDOVSKÁ<sup>1</sup>, J. MOJŽIŠ<sup>2</sup>, M. PILÁTOVÁ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>P. J. Šafárik University, Faculty of Science, Institute Of Chemical Sciences, Moyzesova 11, 040 01 Košice, Slovakia

<sup>2</sup>P. J. Šafárik University, Faculty of Medicine, Department of Pharmacology, SNP 1, 040 66 Košice, Slovakia

Korešpondenčný autor: zuzana.curillova@upjs.sk

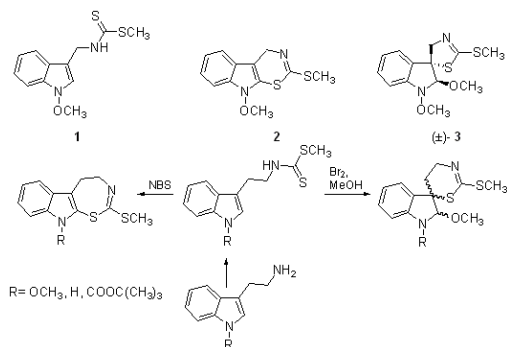
1-Methoxyindole phytoalexins isolated from plants of the family *Cruciferae* are inducible phytochemicals produced by Brassica plants in response to several forms of stress,

including microbial infection [1]. Some of them exhibit antiproliferative effects in T-Jurkat leukemic cells [2]. Typical representatives of 1-methoxyindole phytoalexins are 1-methoxybrassinin (**1**) isolated from Chinese cabbage, sinalbin B (**2**) from white mustard, (2*R*,3*R*)-(-)-1-methoxyspirobrassinol methyl ether (**3**) from Japanese radish [1].

It was found that prolonging of alkane linker of brassinin derivatives leads to more potent inhibitor of indoleamine 2,3-dioxygenase (IDO), a new cancer immunosuppression target. [3]. In this contribution the synthesis and antiproliferative activity of homoanalogues of 1-methoxybrassinin, sinalbin B and 1-methoxyspirobrassinol methyl ether is described.

*This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-0514-06.*

- [1] Review about cruciferous phytoalexins: Pedras M. S. C., Jha M., Ahiahou P. W. K.: *Curr. Org. Chem.* 2003, 7, 1635.
- [2] Pilátová M., Šarišský M., Kutschy P., Miroššay A., Mezencev R., Čurillová Z., Suchý M., Monde K., Miroššay L., Mojžiš J.: *Leukemia Res.* 2005, 29, 415.
- [3] Gaspari P., Banerjee T., Malachowski W. P., Muller A. J., Prendergast G. C., DuHadaway J., Bennett S., Donovan A. M.: *J. Med. Chem.* 2006, 49, 684.



### 3Po-Po9

#### PŘÍPRAVA, CHARAKTERIZACE A KATALYTICKÁ AKTIVITA (5-ISOPROPYL-1,5-DIMETHYL-4,5-DIHYDRO-1H-IMIDAZOL-4-ON-2-YL)PYRIDINU.

P. DRABINA, M. SEDLÁK

*Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Katedra organické chemie*

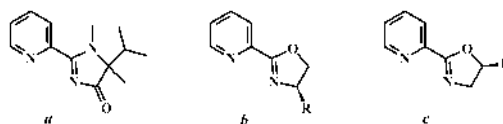
Korešpondenčný autor: [pavel.drabina@upce.cz](mailto:pavel.drabina@upce.cz)

Byl připraven a charakterizován (5-isopropyl-1,5-dimethyl-4,5-dihydro-1*H*-imidazol-4-on-2-yl)pyridin (**a**), a to jak v racemické tak i opticky čisté formě. Tato sloučenina patří do skupiny *N,N*-bidentátních chirálních ligandů, které nacházejí uplatnění zejména jako enantioselektivní katalyzátory rozličných asymetrických procesů. Námí připravený ligand (**a**) obsahuje ve srovnání s klasickými oxazolinovými ligandy **b** [1] chirální centrum na vzdálenějším uhlíkovém atomu heterocyklického systému. Toto posunutí chirálního centra může v některých případech významně zvýšit enantioselektivitu ligandu, což bylo pozorováno např. u oxazolinových ligandů **c** [2] (Obr. 1).

Příprava 5-isopropyl-1,5-dimethyl-4,5-dihydro-1*H*-imidazol-4-on-2-yl)pyridinu (**a**) vycházela se snadno dostupného 2-amino-2,3-dimethylbutanamidu [3], který byl modifikován třístupňovou syntézou na 2-*N*-methylamino-2,3-dimethylbutanamid. Struktura tohoto klíčového meziprojektu byla určena rentgenostrukturální analýzou. Následnou kondenzační reakcí 2-*N*-methylamino-2,3-dimethylbutanamidu s kyselinou pyridin-2-karboxylovou za přítomnosti *N,N'*-diisopropylkarbodiimidu byl získán požadovaný produkt, který byl charakterizován spektroskopickými metodami a rentgenostrukturální analýzou. Katalytická aktivita ligandu **a** byla studována při *Kharash-Sosnovského* allylové oxidaci.

*Práce byla podpořena projektem Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy MSM 002 162 7501.*

- [1] G. Desimoni, G. Faita, P. Quardelli P., *Chem. Rev.* 103 (2003) 3119-3154.
- [2] A. V. Malkov, A. Liddon, P. R. Lopez, L. Bendová, D. Haigh, P. Kočovský, *Angew. Chem. Int. Ed.* 45 (2006) 1432-1435.
- [3] M. Sedlák, P. Drabina, R. Keder, J. Hanusek, I. Císařová, A. Růžička, *J. Organomet. Chem.* 691 (2006) 2623-2630.



Obr. 1

### 3Po-Po10

#### SYNTEZA GLYKOKONJUGÁTŮ: POLYSACHARIDY AKO NOSIČE ANTIGÉNOV

P. FARKAŠ

Chemický ústav SAV

Korešpondenčný autor: *chempalo@savba.sk*

Celosvetovým zdravotným problémom sú bakteriálne, parazitové a vírusové infekcie. Povrch buniek väčšiny patogénov je pokrytý množstvom sacharidov. Tieto sú v "prvej línii" vo vojne s imunitným systémom. Zrejme preto sú medzi druhmi, ale aj v rámci druhu štruktúrálné mimoriadne variabilné. Vyvolaním špecifickej imunitnej odpovede proti povrchovým sacharidovým antigénom môže byť získaná ochranná a dlhotrvajúca imunita. Polysacharidy sú všeobecne slabé imunogény. Polysacharidový antigén, alebo haptén sa viaže na imunogénny proteín - aby získal vlastnosť imunogénu. My sme sa rozhodli použiť ako primárny nosič pre antigén (O-špecifický polysacharid získaný z LPS *Vibrio cholerae*) polysacharidový reťazec. Na tento účel sme vybrali dva deriváty (1→3)- $\beta$ -D-glukánu (*Saccharomyces cerevisiae*). Glukán má známe imunostimulačné vlastnosti, ale je nerozpustný vo vodných roztokoch. Preto sme tento derivatizovali tak, aby bol rozpustný, ale zároveň zostala zachovaná jeho biologická účinnosť. Použili sme karboxymetylglukán a oxidovaný glukán (glukurónoglukán). Funkčné skupiny potrebné na kovalentné viazanie antigénu sme do molekuly zabudovali ramienkami. Ramienka naviazané na glukány cez karboxylovú skupinu majú na opačnom konci chránenú aldehydovú skupinu. Po odmaskovaní, sa na tento derivát úspešne viazal antigén (O-špecifický polysacharid). Získaný glykokonjugát sa charakterizoval pomocou NMR spektroskopie. Porovnaním signálov sa určil približný počet naviazaných hapténov na glukánoch. Získaný údaj sa porovnal s molekulovou hmotnosťou zistenou s gélovou chromatografiou. Glykokonjugát sa v ďalšom kroku kovalentne viaže na proteín. Takto pripravený konštrukt je určený na imunologický výskum.

### 3Po-Po11

#### KINETICS OF STYRENE AND BUTYL ACRYLATE POLYMERIZATION IN ANIONIC MICROEMULSIONS IN PRESENCE OF LAYERED SILICATES

L. FIALOVÁ<sup>1</sup>, I. CAPEK<sup>1</sup>, R. IANCHIS<sup>2</sup>, M.C. COROBEA<sup>2</sup>, D. DONESCU<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Polymer Institute of SAS, Dúbravská cesta 9, 84236 Bratislava

<sup>2</sup>National R-D Institute for Chemistry and Petrochemistry - ICECHIM, Bucharest

Korešpondenčný autor: *upolfial@savba.sk*

In recent years polymer/layered silicate (PLS) nanocomposites have attracted great interest, both in industry and in academia, because they often exhibit remarkable improvement in materials properties when compared with virgin polymer or conventional micro and macrocomposites. Currently, two main methods were developed to prepare the polymer/clay nanocomposites: (1) melt or solution intercalation and (2) in situ polymerization, including bulk, solution, or emulsion polymerization.

The effect of several layered silicates (sodium montmorillonite and different organomodified montmorillonites) on kinetics of styrene (St) and butyl acrylate (BuA) in anionic (sodium dodecyl sulfate) microemulsion polymerization was investigated. We studied the influence of different layered silicates, montmorillonite type (Cloisite Na, Cloisite 30B, and Cloisite 20A) with different polarity on the kinetic, colloidal and molecular weight parameters of microemulsion polymerization of styrene or butyl acrylate. Thus, the variations of maximum rate of polymerization ( $R_{p,max}$ ), particle dimensions ( $d_p$ ), number of polymer particles ( $N_p$ ), the average number of radicals per particle ( $n$ ), desorption rate constants ( $k_{des}$ ) of radicals from particles, and the viscosity average molecular weight ( $M_v$ ) with the reaction conditions were investigated.

All the kinetics parameters are influenced both by the monomer and layered silicate polarity. The decreasing values of the desorption constants calculated by all used models (Ugelstadt, Nomura, Gilbert) in the presence of clays, showed a clear effect induced by the presence of the inorganic layers, which implies the decreasing of the probability of the radicals exit in the presence of the layered silicates.

*This research was supported by the VEGA and APVV through the Grants No. 2/7013/27 and APVT-20-017304.*



## 3Po-Po12

## TLAKOVO-CITLIVÉ ADHEZÍVA PLNENÉ ANORGANICKÝM ALEBO ORGANICKÝM POKOVENÝM PLNIVOM

Š. FLORIÁN, I. NOVÁK

Ústav polymérov, Slovenská Akadémia Vied, Dúbravská cesta, SK-84236 Bratislava, Slovenská republika

Korešpondenčný autor: upolflor@savba.sk

Tlakovo-citlivé adhezíva (pressure-sensitive adhesives, PSA) disponujú permanentnou lepivosťou a sú pri pôsobení tlaku schopné vytvoriť adhézne spojenie medzi dvoma lepenými povrchmi (1, 2). Na vlastnosti a použitie elektricky vodivých samolepivých filmov sa kladú osobitné požiadavky. Na prípravu kvalitných PSA sa využívajú niektoré polymérne matrice, napr. polyméry na báze akrylátov, ktoré možno modifikovať elektricky vodivým plnivom na báze uhlíka, kovov alebo pokovených častíc (3). Elektricky vodivé PSA sa používajú predovšetkým na prípravu elektricky vodivých pásov, ktoré pozostávajú z nosnej fólie a z PSA, ktoré musí mať adhézne charakteristiky kombinované s požadovanými elektrickými vlastnosťami. Bezprúdovým pokovením anorganických (čadič, wollastonit, kremeň) alebo polymérnych (polyamid 6, polyamid 12) častíc striebrom sa dosiahne pokrytie týchto častíc jemnou vrstvou kovu a takto pripravené elektricky vodivé plnivo je možné použiť na prípravu elektrovodivých PSA. Príspevok je venovaný štúdiu adhézných a elektrických vlastností kompozitných PSA pozostávajúcich z polymérnej matrice na báze akrylátov a anorganických (wollastonit) alebo polymérnych (polyamid 6) pokovených častíc. Zo závislosti logaritmu vnútorného elektrického odporu od koncentrácie plniva pre kompozitné PSA na báze polyakrylátu plnené postriebrenými časticami čadiča alebo polyamidu 6 vyplýva, že v PSA sa dosiahne perkolačná koncentrácia v prípade čadiča pri 55 hmot. %, pri použití častíc PA 6 pri prekročení obsahu plniva 35 % PA 6 v PSA kompozite.

Slovenskej grantovej agentúre VEGA (grant č. 2/7103/27) za podporu výskumu.

- [1] Novák I, Florián S.: J. Mater. Sci. Lett. 22, 2003, 1237.
- [2] Novák I, Krupa I, Chodák I.: Synth. Met. 144, 2004, 13.
- [3] Novák I, Florián S, Pollák V.: Intern J. Polymeric Mater. 56, 2007, 1.

## 3Po-Po13

## STRUCTURE OF ORTHO-SUBSTITUTED ARYLBORONIC ACIDS

B. FRACZAK<sup>1</sup>, M.K. CYRAŃSKI<sup>1</sup>, A. SPORZYŃSKI<sup>2</sup>, A. LEWANDOWSKA<sup>2</sup><sup>1</sup>Department of Chemistry, University of Warsaw<sup>2</sup>Faculty of Chemistry, Warsaw University of Technology

Korešpondenčný autor: bstep@chem.uw.edu.pl

Boronic acids are capable to form reversible covalent complexes with sugars, amino acids, hydroxamic acids and other systems with vicinal, (1,2) or occasionally (1,3) substituted Lewis base donors like alcohols, amines or carboxylates [1]. For this feature they are extensively used in the area of molecular recognition, predominantly to bind to saccharides for fluorescent detection or for selective molecular transport of saccharides across lipophilic membranes [2]. Derivatives of phenylboronic acid with the  $\text{CH}_2\text{NR}_1\text{R}_2$  or  $\text{CHNR}$  substituent in ortho position to  $\text{B}(\text{OH})_2$  group are of special interest in this context. A typical fluorescent receptor consists of a fluorophore linked by a spacer to the receptor containing  $\text{B}(\text{OH})_2$  group. The interaction of the  $\text{B}(\text{OH})_2$  group with the nitrogen atom plays the key role in the action of the compounds. In the model case (where  $\text{R}_1, \text{R}_2, \text{R}=\text{H}$ ) the  $\text{N} \rightarrow \text{B}$  donor-acceptor interactions (structure IA, IIA) may efficiently compete with an intramolecular hydrogen bond formed between hydroxy group and a nitrogen atom in beta position (structure IIA, IIC), as shown in Figure below [3]. Additionally the BN bonds may be also formed if the aryloboronic acid is substituted by  $\text{CH}_2\text{NHR}$  group (structure IIB). Although the stabilities of the above forms are comparable, a substituent at phenyl ring and/or at nitrogen may influence the relative energies and in consequence favor one of the structures. This point is analyzed in terms of substituent effect stabilization energy (SESE) [4]. The examples of both types of structures in the solid state are also presented and discussed [5].

This work has been supported by KBN grant no N204 019 32/0614.

- 1 T. D. James, S. Shinkai, Top. Curr. Chem. 2002, 218, 159. [2] D. G. Hall (Ed), Boronic Acids, Wiley-VCH, Weinheim, 2005. [3] L. Zhu, S. H. Shabbir, M. Gray, V. M. Lynch, S. Sorey, E. V. Anslyn, J. Am. Chem. Soc. 2006, 128, 1222. [4] For review see: T. M. Krygowski, B. T. Stepień, Chem. Rev. 2005, 105, 3482. [5] A. Sporzyński, A. Lewandowska, B. T. Frączak, M. K. Cyranski, submitted.





## 3Po-Po14

## SYNTHESIS OF NOVEL BIOLOGICALLY INTERESTING ACRIDINE CARBOXAMIDES AND HYDRAZIDES.

Z. FRÖHLICHOVÁ, J. IMRICH, P. KRISTIAN, I. DANIHEL, S. HAMULÁKOVÁ

Department of Organic Chemistry, Institute of Chemistry, Faculty of Sciences, P. J. Šafárik University, Košice

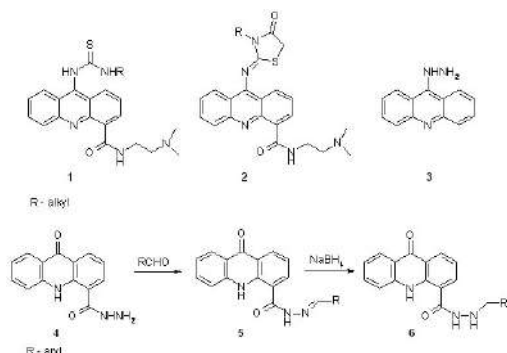
Korešpondenčný autor: zdenka.frohlichova@upjs.sk

Among the different classes of topoisomerase affecting agents, acridine carboxamides play a significant role. In our search for new active acridine compounds, 9-thioureidoacridine-4-(2-dimethylaminoethyl)carboxamides **1** have been derivatized using cyclocondensation with methyl bromoacetate to give acridinylcarboxamides substituted by thiazolidinones **2**. The reactant **1** was obtained from 9-isothiocyanatoacridine-4-carboxamide via 9-chloroacridine-4-carboxamide.

To explore a novel group of compounds possessing a carbohydrazide moiety instead of the carboxamide one, new acridine-4-carbohydrazides have been prepared. As a starting compound, 9-oxo-9,10-dihydroacridine-4-carboxylic acid hydrazide **4** was synthesized and let to react further with aromatic aldehydes to give intermediate hydrazones **5** and final reduced forms **6**. To compare reactivity of the hydrazine functionality in the position 4 and 9 of acridine, 9-hydrazinoacridine **3** was also obtained to be tested in appropriate condensation and reduction reactions. The structure of compounds under study has been proved by  $^1\text{H}$  and  $^{13}\text{C}$  NMR spectroscopy and quantum chemical calculations.

Financial support of this work by the Slovak Grant Agency VEGA (Grant No. 1/2471/05) is gratefully acknowledged.

- [1] Goodell J.R., Madhok A.A., Hiasa H. Ferguson D.M.: Bioorg. Med. Chem. 14, 5467 (2006).
- [2] Adams A., Guss J.M., Collyer C.A., Denny W.A., Prakash A.S., Wakelin L.P.G.: Mol. Pharmacol. 58, 649 (2000).



Acridine and acridone chromophores.

## 3Po-Po15

## NOVÉ KAPALNÉ KRYSTALY S BIFENYLOVÝM JÁDREM S LATERÁLNÍ SUBSTITUCÍ

F. HAMPL<sup>1</sup>, R. JUROK<sup>1</sup>, J. SVOBODA<sup>1</sup>, V. NOVOTNÁ<sup>2</sup>, M. GLOGAROVÁ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vysoká škola chemicko-technologická Praha

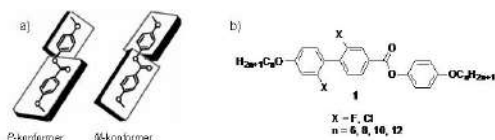
<sup>2</sup>Fyzikální ústav AV ČR, v. v. i.

Korešpondenčný autor: hamplf@vscht.cz

V posledních dobách se objevily práce [1,2] diskutující možnost vzniku konformační chiralit u některých typů achirálních kalamitických kapalných krystalů tvořících smectické C (SmC) fáze (obr. a). Popsaný jev by mohl mít značný význam v případech, kdy se generují chirální smectické C (SmC\*) fáze z achirálních SmC fází účinkem chirálních dopantů. Lze předpokládat, že látky vykazující spontánní vznik chirálních domén v SmC fázi [1] budou výrazně zesilovat účinek chirálních dopantů [3]. Cílem této práce byla syntéza potenciálních mesogenů obecné struktury **1** (obr. b) a studium jejich mesomorfního chování. Předpokládali jsme, že laterální substituce v polohách 2,2' bifenylového jádra by mohla vést ke konformační chiralitě ve vzniklých mesofázích. Základní studium mesomorfního chování látek **1** bylo provedeno pomocí optické polarizační mikroskopie a kalorimetrických měření (DSC). Výsledky ukázaly, že pro laterální substituci v polohách 2,2' bifenylového systému jsou vhodné pouze atomy fluoru; substituce objemnějšími atomy chloru již vedla k potlačení mesofází. Zavedením atomu fluoru do molekuly mesogenu se výrazně snížily přechodové teploty u jednotlivých fází, zároveň však došlo k vymizení některých smectických fází, které se vyskytují u nesubstituovaných látek **1**. U látek **1** laterálně substituovaných atomy fluoru tak byly pozorovány pouze SmC a nematické fáze. Existenci konformační chiralit u látek **1** se nám zatím nepodařilo prokázat.

Autoři děkují MŠMT ČR za podporu této práce (výzkumný záměr MSM 6046137301).

- [1] Kajitani T., Masu H., Kohmoto S., Yamamoto M., Yamaguchi K., Kishikawa K.: J. Am. Chem. Soc., 2005, 127, 1124.
- [2] Walba D. M., Korblova E., Huang C. C., Shao R., Nakata M., Clark N. A.: J. Am. Chem. Soc., 2006, 128, 5318.
- [3] Lemieux R.P.: Acc. Chem. Res., 2001, 31, 845 a citace uvedené v této práci.

**3Po-Po16****SYNTÉZA NOVÝCH GLYKOKONJUGÁTOV AKRIDÍNOVÉHO TYPU**

S. HAMULÁKOVÁ<sup>1</sup>, E. BALENTOVÁ<sup>2</sup>, J. IMRICH<sup>1</sup>, P. KRISTIAN<sup>1</sup>, L. DRAJNA<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Department of Organic Chemistry, Institute of Chemistry, Faculty of Sciences, P. J. Šafárik University, Košice

<sup>2</sup>Departamento de Química Orgánica-I, Universidad del País Vasco, Facultad de Química, Apdo 1072, 20080 San Sebastian,

<sup>3</sup>Katedra Organickej Chémie, Ústav Chemických Vied, Prírodovedecká Fakulta, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika

Korešpondenčný autor: slavkaham@gmail.com

Glykokonjugáty, u ktorých je glykozidická zložka naviazaná na aglykón so zaujímavými biologickými vlastnosťami zaujali značnú pozornosť vo vývoji nových antikancerogénnych a antivirálnych liečiv. Zamerali sme sa na prípravu glykokonjugátov akridínu, v ktorých sa sacharidová časť molekuly pripojuje na biologicky aktívny akridínový skelet cez linker, alebo cez tiazolidínový heterocyklus.

Ako vhodné sacharidové prekurzory sme zvolili glykozylizotiokyanáty<sup>1</sup>, pripravené konverziou peracetylovaných sacharidov s trimetylsilylizotiokyanátom za prítomnosti  $SnCl_4$ . Príslušné tiosemikarbazidy **1** boli pripravené pôsobením tetra-*O*-acetyl- $\beta$ -glykozyl izotiokyanátov s hydrazinoakridínom<sup>2</sup> a tiomočoviny **2** obdobne reakciou s 9-aminometylakridínom<sup>3</sup>. Tiosemikarbazidy **1** a tiomočoviny **2** boli takmer kvantitatívne prevedené na semikarbazidy a močoviny použitím mezitylnitroxidu. Ďalej sa študovali adičné a adično-cyklizačné reakcie tiosemikarbazidov s metyljodidom, ktoré poskytovali glykozylizotiosemikarbazidy **3**. Reakciou tiosemikarbazidov **1** s metylbromacetátom sa pripravili 1',3'-tiazolidín-4'-óny **4**. Pripravené zlúčeniny boli testované na Katedre farmakológie LF UPJŠ Košice na 6-tich rakovinových bunkových líniach.

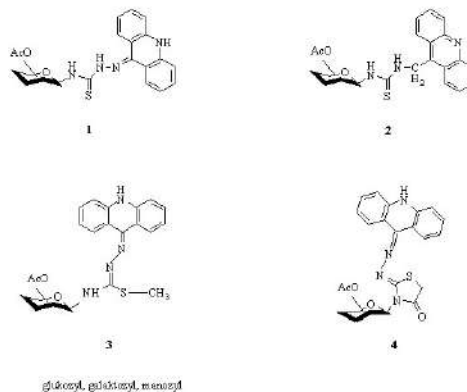
Táto práca bola finančne podporená grantovou agentúrou VEGA (grant č. 1/2471/05) a štátnym programom NMR (grant č. 2003SP200280203).

[1] Al-Masoudi, N.; Hassan, N. A.; Al-Soud, Y.A.; Schmidt, P.; Gaafar, A.; El-Din, M.; Weng, M.; Marino, S.; Schoch, A.; Amer, A.; Joachims J. C.: J. Chem. Soc. Perkin Trans.1, 947-953, (1998).

[2] Balentová, E.; Imrich, J.; Bernát, J.; Suchá, L.; Vilková, M.; Prónayová, N.; Kristian, P.; Pihlaja,

K.; Klika, K. D. J. Heterocyclic Chem., 43, 645-656 (2006).

[3] Géci, I.; Valtamo, P.; Imrich, J.; Kivelä, H.; Kristian, P.; Pihlaja, K. J. Heterocyclic Chem., 43, 907-918 (2005).



## Akridínové glykokonjugáty

**3Po-Po17****STUDIUM AZOKOPULACE BENZENDIAZONIOVÝCH SOLÍ NA ACETON V IONTOVÉ KAPALINĚ**

J. HANUSEK, L. BARBOŘÍKOVÁ, V. MACHÁČEK

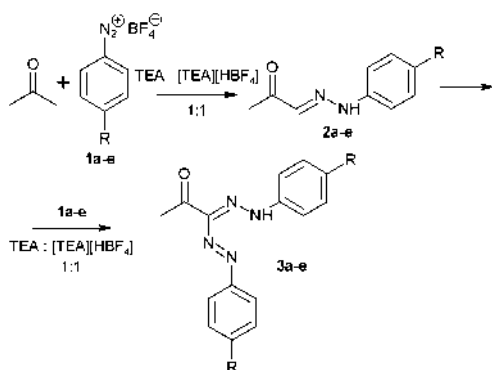
Univerzita Pardubice

Korešpondenčný autor: Jiri.Hanusek@upce.cz

Azokopulační reakce 4-substituovaných benzendiazonium-tetrafluorborátů (**1a-e**) s acetonem v 1-butyl-3-methylimidazolium-tetrafluorborátu (BMIM\*BF<sub>4</sub>) byla studována za přítomnosti triethylaminu (B) a triethylamonium-tetrafluorborátu (BH<sup>+</sup>) (1:1) za podmínek pseudoprvního řádu při 25 °C. Bylo zjištěno, že uvedenou reakcí vzniká v prvním pomalém specificky bazicky katalyzovaném kroku 1-(4-subst. fenylhydrazono)-propan-2-on (**2a-e**), který v druhém, obecně bazicky katalyzovaném kroku reaguje s další molekulou benzendiazonium-tetrafluorborátu za vzniku 1-(4-subst. fenylhydrazono)-1-(4-subst. fenyl diazenyl)propan-2-onu (**3a-e**). Optimalizací získaná pozorovaná rychlostní konstanta ( $k_{poz}$ ) prvního kroku je jen málo závislá na koncentraci katalyzující báze, kdežto u druhého kroku roste strmě a lineárně s rostoucí koncentrací triethylaminu. Srovnání azokopulace na aceton a hexadeuterioaceton bylo možné pouze pro první krok, protože produktem azokopulace na hexadeuterioaceton je pouze deuterovaný analog 1-(4-subst. fenylhydrazono)-propan-2-onu. Zjištěný kinetický izotopový efekt je malý ( $k_H/k_D = 2,2-2,4$ ). Malý lineární nárůst  $k_{poz}$  prvního kroku s rostoucí koncentrací triethylaminu pravděpodobně

nepřísluší obecné bazické katalýze a rychlost určujícím krokem reakce je stejně jako ve vodě reakce aniontu acetonu s diazoniovou solí. Malý lineární vzestup  $k_{poz}$  vs. [B] může být vysvětlen vlivem rostoucí koncentrace [B] na aktivitní koeficient báze a tím i na polohu acidobazické rovnováhy mezi nereaktivním acetonem a reaktivním aniontem acetonu.

Autoři děkují Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy za finanční podporu při řešení tohoto projektu (č. MSM 002 162 7501).



Schéma

### 3Po-Po18

#### OLIGO TRÖGER'S BASES - NEW BUILDING BLOCKS FOR MOLECULAR ARCHITECTURE

M. HAVLÍK<sup>1</sup>, V. KRÁL<sup>1</sup>, B. DOLENSKÝ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vysoká škola chemicko-technologická Praha

<sup>2</sup>Department of Analytical Chemistry, Institute of Chemical Technology in Prague, Technická 5, Prague 6, 16628, Czech Republic

Korešpondenčný autor: havlikm@vscht.cz

Tröger's base derivatives are important building blocks in molecular engineering due to their V-shape and chirality. In general, Tröger's bases are compounds containing two aromatic systems (sidewalls) annelated to a methano-1,5-diazocine. The bisTB derivatives could be described as compounds in which two TB units connect three aromatic systems; i.e., sidewall-TB-core-TB-sidewall. Probably the most important property of bisTB derivatives is their ability to change their geometry under acidic conditions. The sidewalls can be situated on the same side of the core, as in the *syn*-isomer, or on opposite sides, as in the diastereoisomeric *anti*-isomer. Many useful applications, such drug delivery or selective binding triggered by pH can be realized. We have presented a new aminobromide-based protocol, which overcomes the reduction issues inherent in prior amides methodology. It enables the preparation of derivatives, which are not accessible via previous protocols. Thus, the first preparations of bisTB

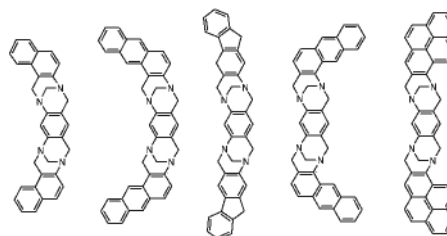
derivatives with sidewalls as large as anthracene are presented. The aminobromide protocol appears useful at least for bisTB derivatives with "troegerable" arylamines as sidewalls. The synthetic methods described herein should be readily applicable to analogous architectures beyond those wherein the central building block is benzene.

This work was supported by MSM 6046137307, LC06077 and WG COST D31/2005/18.

[1] Havlík, M.; Král, V.; Dolenský, B. *Org. Lett.* 2006, 8(21), 4867-4870.

[2] Havlík, M.; Král, V.; Dolenský, B. *Collect. Czech. Commun.* 72(3), 2007, 392-402.

[3] Dolenský, B.; Elguero, J.; Král, V.; Pardo, C.; Valík, M. *Adv. Heterocycl. Chem.* 2007, 93, 1-48.



### 3Po-Po19

#### VPLYV NANOPLNÍV (DISPERAL, CLOISITE A NANOTUBY) NA SVETELNÚ STABILITU POLYPROPYLENOVÝCH NANOKOMPOZITOV.

L. HRČKOVÁ<sup>1</sup>, Š. CHMELA<sup>1</sup>, A. MARCINČIN<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ústav polymérov, Slovenská Akadémia Vied, Dúbravská cesta, SK-84236 Bratislava, Slovenská republika

<sup>2</sup>Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava

Korešpondenčný autor: upollud@savba.sk

Organické íly sú efektívne pevné aditíva pre polypropylénové kompozity. Je známe, že polypropylénové nanokompozity sú svetlom viac degradovateľné ako čisté stabilizované polypropylény<sup>2,3</sup>. V predkladanej práci sa študoval vplyv niektorých nanoplnív (Disperal, Cloisite a nanotuby) na svetelnú stabilitu polypropylénových nanokompozitov. Svetelná degradácia sa sledovala FTIR spektroskopiou. Vyhodnocovala sa oblasť karbonylových produktov, vznikajúcich v priebehu fotooxidácie polypropylénu, ktoré absorbujú v oblasti 1660 - 1850 cm<sup>-1</sup>. Porovnával sa nárast karbonylovej skupiny pri čistých polypropylénoch a PP nanokompozitoch v závislosti od času ožarovania. V experimentálnej

práci boli použité komerčne dostupné PP ako aj aditíva. Potvrdili sa známe poznatky, že polypropylénové koncentráty obsahujúce disperaly majú najkratšiu indukčnú periódu a sú najmenej stabilné z PP koncentrátov, ktoré boli študované. O stupeň lepšie sú na tom PP koncentráty obsahujúce cloisity. Boli pozorované rozdielne stability v závislosti od použitého typu cloisitu. Vzorka obsahujúca Cloisit 30B bola o 20 % stabilnejšia ako vzorka, ktorá obsahuje Cloisit 15A, pri rovnakom obsahu aditíva (10 %). V porovnaní s predchádzajúcimi PP nanokompozitmi, čisté polypropylény boli podstatne svetelne stabilnejšie a indukčná perióda sa predlžovala v závislosti od použitého typu PP. Najstabilnejší polypropylén bol typu PP TG 920. Podobnú svetelnú stabilitu mal aj typ PP 561 R, a o niečo nižšie hodnoty boli pozorované pri type PP 561 N. Najdlhšia indukčná perióda sa získala pri PP nanokompozitoch obsahujúcich nanotrubičky (1 % CNT).

Práca vznikla s podporou grantovej agentúry VEGA 2/5108/25.

- [1] Gianelli W., Ferrara G., Camino G., Pellegati G., Rosental J., Trombini R. C.: *Polymer* 46, 7037 (2005).
- [2] Mailhot B., Morlat S., Gardette J. L., Boucard S., Duchet J., Gerard J. F.: *Polym. Deg. Stab.* 82, 163 (2003.)
- [3] Chmela Š., Kleinová A., Fiedlerová A., Borsig E., Kaempfer D., Thomann R., Mülhaupt R.: *J. Macromol. Sci., Pure Appl. Chem.* 42, 821 (2005).

### 3Po-Po20

#### VYUŽITIE 1,3-DIPOLÁRNYCH CYKLOADÍCIÍ NA BÁZE NITRILOXIDOV V SYNTÉZE NOVÝCH AKRIDINYLOVÝCH HETEROCYKLOV

L. MALUČKÁ<sup>1</sup>, M. VILKOVÁ<sup>1</sup>, J. IMRICH<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Pavla Jozefa Šafárika, Prírodovedecká fakulta, Katedra organickej chémie, Moyzesova 11, 040 01 Košice

<sup>2</sup>Department of Organic Chemistry, Institute of Chemistry, Faculty of Sciences, P. J. Šafárik University, Košice

Korešpondenčný autor: [jan.imrich@upjs.sk](mailto:jan.imrich@upjs.sk)

1,3-Dipolárne cykloadície predstavujú veľký syntetický potenciál a využitie tejto jednoduchšej a všeobecnej cesty vedúcej k päťčlánkovým heterocyklom sa neustále zvyšuje. Skutočnosť, že deriváty akridínu ako biologicky účinné látky doposiaľ okrem dvoch prípadov neboli využité v 1,3-dipolárnych reakciách nás priviedla k zámeru rozšíriť poznatky z oblasti cykloadícií nových typov 4-substituovaných akridínov ako dipolarofilov **2a-c** v reakciách s reaktívnymi nitriloxidmi.

Akridín-4-karbaldehyd (**1**) ako východisková látka sa pripravil šesťstupňovou syntézou podľa publikovaných postupov.<sup>1</sup> Pre štúdium cykloadícií sa zvolili

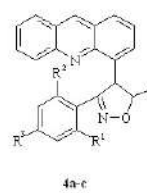
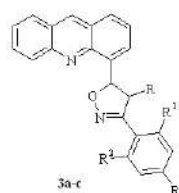
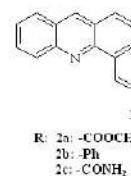
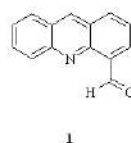
tri typy dipolarofilov, metylester kyseliny 3-(akridin-4-yl)akrylovej (**2a**), 4-styrylakridín (**2b**) a amid kyseliny 3-(akridin-4-yl)akrylovej (**2c**), ktoré boli pripravené Wittigovou reakciou.<sup>2</sup>

Hlavným cieľom tejto práce bolo preskúmanie regioselectivity 1,3-dipolárnych cykloadícií dipolarofilov **2a-c** s vhodnými arylnitriloxidmi. Cykloadície nitriloxidov na 4-substituované akridínové dipolarofily **2a-c** poskytli dva regioizoméry, 5-(akridin-4-yl)-3-aryl-4-R-4,5-dihydroizoxazolíny **3a-c** a 4-(akridin-4-yl)-3-aryl-5-R-4,5-dihydroizoxazolíny **4a-c** v rôznych pomeroch.

Pripravené zlúčeniny sú kombináciou troch cyklických štruktúr, ktoré ako očakávame, by mohli napomáhať lepšej interkalácii do DNA, jedného z hlavných mechanizmov biologickej účinnosti akridínov.

Táto práca bola finančne podporená grantovou agentúrou VEGA (grant č. 1/2471/05) a štátnym programom NMR (grant č. 2003SP200280203).

- [1] Klanderman, B. H. *J. Org. Chem.* 31, 2618-2620 (1966).
- [2] Vedejs, E.; Marth, C. F.; Ruggeri, R. *J. Am. Chem. Soc.* 110, 3940-3948 (1988).



4-Substituované akridínové deriváty.

### 3Po-Po21

#### SYNTÉZA, ŠTRUKTÚRA A CYTOTOXICITA NOVÝCH INTERKALÁTOROV NA BÁZE PROFILAVÍNU

J. UNGVARSKÝ<sup>1</sup>, L. JANOVEC<sup>2</sup>, J. IMRICH<sup>3</sup>, P. KRISTIAN<sup>3</sup>, D. SABOLOVÁ<sup>4</sup>, M. KOŽURKOVÁ<sup>4</sup>

<sup>1</sup>UPJŠ Košice, Prírodovedecká Fakulta

<sup>2</sup>Katedra Organickej Chémie, Ústav Chemických Vied, Prírodovedecká Fakulta, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika

<sup>3</sup>Department of Organic Chemistry, Institute of Chemistry, Faculty of Sciences, P. J. Šafárik University, Košice

<sup>4</sup>Univerzita P. J. Šafárika, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Košice

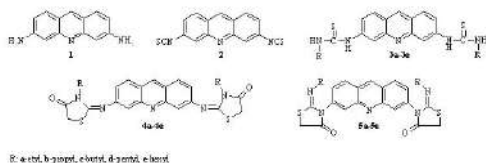
Korešpondenčný autor: jan.imrich@upjs.sk

Deriváty akridínu sú už dávno známe ako biologicky aktívne látky so širokým spektrom biologických vlastností (antikancerogénnej, antibakteriálnej, antimalarickej a ďalších)<sup>1</sup>. Cieľom práce bolo obohatiť skupinu týchto zaujímavých látok o deriváty proflavínu (3,6-diaminoakridínu) (**1**), patriaceho do skupiny farmakofórov s vysokou fluorescenciou<sup>2</sup>. S cieľom zvýšiť jeho farmaceutické vlastnosti sa štruktúra proflavínu derivatizovala biologicky aktívnym tiazolidínovým skeletom. Východisková látka, 3,6-diizotiokyanátoakridín (**2**), sa pripravil reakciou proflavínu (**1**) s tiofosgénom. Ďalším krokom syntézy bola príprava tiomočovín **3a-3e** reakciou diizotiokyanátu **2** s alifatickými nerozvetvenými amínmi. Príslušné tiazolidinóny **4a-4e** boli obdržané reakciou tiomočovín **3a-3e** s metylbromacetátom. Pre získanie opačných regioizomérov **5a-5e** sa vypracovala syntéza s využitím bromacetylbromidu. Štruktúra pripravených zlúčenín bola potvrdená <sup>1</sup>H a <sup>13</sup>C NMR spektroskopiou a ich biologická účinnosť sa testovala na rakovinových bunkových líniiach L1210 a HeLa.

Táto práca bola finančne podporená grantovou agentúrou VEGA (grant č. 1/2471/05) a štátnym programom NMR (grant č. 2003SP200280203).

[1] Ferguson, L. R., Denny, W. A. 1991: Mutation Research 258: 123-160

[2] Acheson, R. M., Wiley, J. 1973: Acridines, N. Y.: 727-772



Proflavín a jeho deriváty

3Po-Po22

### CHARAKTERIZÁCIA BIODEGRADOVATEĽNÝCH POLYMÉRNÝCH KOMPOZITOV

I. JANIGOVÁ<sup>1</sup>, D. MOŠKOVÁ<sup>1</sup>, I. CHODÁK<sup>1</sup>, K. CSOMOROVÁ<sup>1</sup>, F. LEDNICKÝ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ústav polymérov, Slovenská Akadémia Vied, Dúbravská cesta, SK-84236 Bratislava, Slovenská republika

<sup>2</sup>Ústav makromolekulární chemie, Akademie věd České republiky, Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6

Korešpondenčný autor: upoljani@savba.sk

Biodegradovateľné polymérne kompozity plnené anorganickými plnivami, predovšetkým montmorillonitom (MMT), sa stali v posledných rokoch predmetom záujmu vzhľadom na ich prínos pre životné prostredie a možnosť zlepšenia hlavne mechanických, termických a barierových vlastností pri malom množstve prítomného plniva (vd'aka vrstevnatej štruktúre MMT) (1-3).

Predložená práca je zameraná na štúdium morfológie, mechanických a termických vlastností biodegradovateľných polymérnych kompozitov plnených rôznymi typmi MMT pripravených konvenčným spôsobom miešaním v tavenine. Porovnávali sa vlastnosti kompozitov na báze dvoch biodegradovateľných matric - polykaprolaktónu (PCL) a zmesi PCL/termoplastický škrob (Mater Bi, 1:1). Tri typy aplikovaného MMT sa líšili veľkosťou častíc a modifikáciou. Nanofil 15 sa použil ako jediné čiastočne interkalované plnivo. Účelom práce je aj posúdenie možnosti prípravy nanokompozitov konvenčným miešaním v tavenine.

Výsledky z röntgenovej difrakcie a elektrónovej transmisnej mikroskopie ukázali, že počas prípravy vzorky s plnivom Nanofil 15 dochádza k vzniku nanokompozitu s čiastočnou exfoliáciou častíc plniva. Pri ostatných plnivách sa pozorovala len čiastočná interkalácia plniva v medzivrstvovom priestore.

Zlepšené mechanické vlastnosti kompozitov korelujú s predchádzajúcimi výsledkami v prípade vzoriek PCL/plnivo. Pri kompozitoch s matricou Mater Bi nie sú výsledky jednoznačné, pravdepodobne z dôvodu nižšej adhézie medzi matricou a plnivom.

Štúdium termooxidácie stability pripravených kompozitov nepriamo potvrdilo predpoklad vzniku nanokompozitov v prípade plniva Nanofilu 15, hlavne v PCL matrici, vzhľadom na výrazný posun teplôt termooxidácie smerom k vyšším hodnotám. Termická analýza vzoriek metódou DSC zaznamenala rast kryštalinity v kompozitoch v porovnaní so samotnými polymérmi, teda plnivá pôsobia ako nukleačné činidlá.

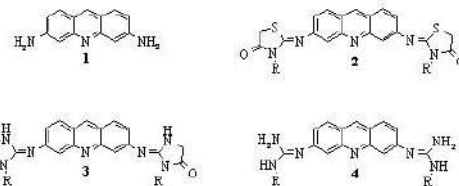
Charakterizácia pripravených biodegradovateľných kompozitov potvrdila vznik čiastočne exfoliovaného nanokompozitu, ktorý bol pripravený v komôrke plastografu Brabender miešaním v tavenine pri aplikácii čiastočne interkalovaného MMT.

Autori ďakujú za finančnú podporu Slovenskej agentúry pre podporu vedy - Projekt č. APVV 51-050505.

[1] Y. Di, S. Iannace, E. Di Maio, L. Nicolais, J. Polym. Sci.: Part B: Polym. Phys. 2003, 41, 670.

[2] E. Di Maio, S. Iannace, L. Sorrentino, L. Nicolais, Polymer 2004, 45, 8893.

[3] S. Hotta, D.R. Paul, Polymer 2004, 45, 7639.



### 3Po-Po23

## IMIDAZOLIDINÓNY A GUANIDÍNY PROFLAVÍNU AKO NOVÁ TRIEDA BIOLOGICKY ATRAKTÍVNYCH ZLÚČENÍN

L. JANOVEC<sup>1</sup>, J. UNGVARSKÝ<sup>2</sup>, J. IMRICH<sup>3</sup>, P. KRISTIAN<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Katedra Organickej Chémie, Ústav Chemických Vied, Prírodovedecká Fakulta, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika

<sup>2</sup>UPJŠ Košice, Prírodovedecká Fakulta

<sup>3</sup>Department of Organic Chemistry, Institute of Chemistry, Faculty of Sciences, P. J. Šafárik University, Košice

Korešpondenčný autor: janoveclad@yahoo.com

Proflavín (**1**) v dôsledku DNA a RNA interkalácie vykazuje výraznú antitumorovú<sup>1</sup>, antibakteriálnu<sup>2</sup> a antivirálnu aktivitu<sup>3</sup> pričom jeho 3,6- a 3,6,9-substituované deriváty sú známe ako vysoko účinné inhibítory telomeráz. Tieto uvedené fakty robia z proflavínu (**1**) zaujímavý syntón pre cieľenú syntetickú modifikáciu so zámerom dosiahnuť vyššiu účinnosť novosyntetizovaných derivátov.

Vychádzajúc z našej predchádzajúcej práceo antitumorových účinkoch proflavínových derivátov **2** rozhodli sme sa nadviazať na získané výsledky a nahradiť tiazolidinón príslušným imidazolidinónovým cyklom a jeho kvázi necyklickou formou guanidínom za účelom obdržania nových zlúčenín typu **3**, **4** s vyššou biologickou účinnosťou.

Ako východzia zlúčenina na prípravu týchto derivátov sa využil príslušný karbodiimid získaný vhodným reakčným postupom z tiomočovín pripravených reakciou 3,6-diizotiokyanátoakridínu s alkyl amínmi. Príslušné imidazolidinóny sa následne obdržali adično-cyklizačnou reakciou glycinetylésteru s karbodiimidom respektíve adíciou amoniaku v prípade prípravy guanidínov.

Táto práca bola finančne podporená Slovenskou grantovou agentúrou VEGA (grant č. 1/2471/05) a štátnym programom NMR (grant č. 2003SP200280203)

[1] Pamela K. Dominick, Brian R. Keppler, Jason D. Legassie, Ian K. Moon and Michael B. Jarstfer: Bioorg. Med. Chem. Lett.; 14, 3467-3471, 2004.

[2] Mark Wainwright: J. Antimicrob. Chemother.; 47, 1-13, 2001.

[3] Theodore Finkelstein, I. Bernard Weinstein: J. Biol. Chem.; 242, 17, 10, 3763-3768, 1967.

Proflavín a jeho deriváty

### 3Po-Po24

## UMĚLÉ POVĚTRNOSTNÍ STÁRNUTÍ PVC

R. KALOUSKOVÁ<sup>1</sup>, M. ŠVARCOVÁ<sup>2</sup>, L. MASTNÝ<sup>3</sup>, Z. ŠRANK<sup>1</sup>, R. SLAVĚTÍNSKÁ<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Vysoká škola chemicko-technologická Praha

<sup>2</sup>VŠCHT v Praze, Ústav polymerů, Technická 5, 166 28 Praha 6

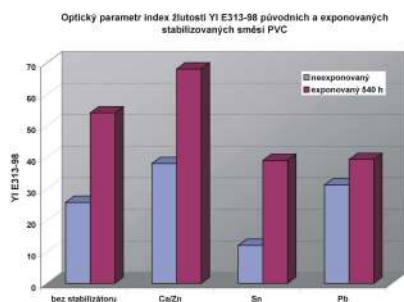
<sup>3</sup>VŠCHT v Praze, Ústav anorganické chemie

Korešpondenčný autor: radka.kalouskova@vscht.cz

Snaha získať čo najrychlejšie údaje o odolnosti materiálu poveternostným vlivům vedľa už pred viac jak půl stoletím ke konstrukci přístrojů simulujících poveternostní stárnutí. Veterometry urychlují procesy stárnutí za reprodukovatelných a kontrolovatelných podmínek a jejich význam roste s rozšiřováním aplikačních možností polymerů a s rozvojem nových polymerních materiálů. Nicméně využití veterometrů k předpovědi životnosti materiálů v přirozených podmínkách je stále v procesu vývoje. Práce je příspěvkem ke studiu umělého poveternostního stárnutí stabilizovaných směsí polyvinylchloridu. Směsi PVC obsahující pouze tepelný stabilizátor ( na bázi karboxylátu Ca/Zn, organocínčitě sloučeniny, resp. bazického síranu olovnatého) byly exponovány v xenonové testovací komoře Q-Sun při podmínkách tzv. Florida testu. V průběhu stárnutí byly folie hodnoceny z hlediska poklesu tepelné stability, změny optických parametrů a vývoje polyenových sekvencí na řetězci polymeru. Exponované vzorky byly rovněž podrobeny mechanickým zkouškám. Z výsledků vyplývá, že přítomnost stabilizátoru zpomalila degrační procesy vedoucí k ztmavnutí směsi PVC, přičemž podle očekávání průběh stárnutí závisel na typu použitého tepelného stabilizátoru. Obecně je možné konstatovat, že účinnější tepelný stabilizátor lépe chránil směs i před světelným namáháním. Výsledky je možné znázornit např. jako změnu indexu žlutosti, jak název napovídá, charakterizující žloutnutí původních a exponovaných vzorků viz. obr.. Pevnost v tahu směsí stabilizovaných buď stearany Ca/Zn nebo organocínčitou sloučeninou se po 500 hodinové expozici světlu příliš nezměnila, po 1500 hodinách klesla na 82% původní pevnosti. Naproti tomu směs stabilizovaná Pb sloučeninou vykazovala po expozici vyšší pevnost (cca o 20%), pravděpodobně v důsledku síťování.

Tato práce byla řešena jako součást výzkumného záměru MSM 6046137302 Příprava a výzkum funkčních materiálů a materiálových

technológií s využitím mikro- a nanoskopických metód



### 3Po-Po25

#### EASILY AVAILABLE FLUOROUS BUILDING BLOCKS

R. KAPLÁNEK<sup>1</sup>, M. HAVLÍK<sup>1</sup>, Z. KEJIK<sup>2</sup>, T. BŘÍZA<sup>1</sup>, V. KRÁL<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vysoká škola chemicko-technologická Praha

<sup>2</sup>Institute of Chemical Technology

Korešpondenčný autor: robert.kaplanek@vscht.cz

Fluorinated building blocks are widely used in organic syntheses in the field of highly fluorinated compounds (fluorous compounds). They allow connect several fluorinated chains to the nonfluorinated organic skelet and achieve unique properties of the molecules. There are main trends for applications and utilization of highly fluorinated compounds: fluorous biphasic catalysis (FBC); using fluorous tags in fluorous solid phase extraction (F-SPE), fluorous solution phase scavenging or paralel synthesis; preparation of new (nano)materials and biomedical applications.

We developed efficient syntheses of several types of nucleophilic and electrophilic fluorous building blocks from commercially available precursors using common synthetic and separation techniques. (Fig. 1).

Acknowledgement: Authors thank for financial suport. Grant of GAAV No.: KJB401280501

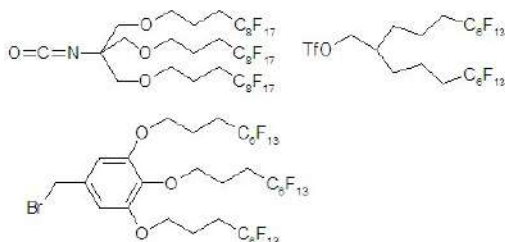


Fig. 1: Prepared fluorous building blocks.

### 3Po-Po26

#### CARBONYLATION OF NITROBENZENE AND ANILINE CATALYZED BY PdCl<sub>2</sub>/Fe<sub>2</sub>/I<sub>2</sub>/Py CATALYTIC SYSTEM - PROPOSITION OF MECHANISM

M. KARPINSKA, J. SKUPINSKA

Department of Chemistry, University of Warsaw

Korešpondenčný autor: monka@chem.uw.edu.pl

The nitro aromatics carbonylation by carbon monoxide is an alternative phosgene-free route to synthesize aromatic isocyanates and carbamates. Such a reaction requires a suitable catalyst. Catalytic activity in the reaction was found for rhodium, ruthenium, palladium and selenium compounds [1,2]. The nitrobenzene carbonylation to carbamates with carbon monoxide in the presence of the PdCl<sub>2</sub>/Fe/I<sub>2</sub>/Py (Py: pyridine) catalyst system is a multi-stage reaction (Scheme1). Nitrobenzene is used up in the following two reactions, viz. it is reduced to aniline by the ethanol hydrogen and it performs as an oxidant in the aniline to diphenylurea carbonylation. Carbamate is produced in a reaction of diphenylurea with ethanol [3]. A study of the effect of substituents in the aromatic ring on the aniline carbonylation reaction in the presence of the PdCl<sub>2</sub>/Fe/I<sub>2</sub>/Py catalytic system, where oxygen or nitrobenzene was used as an oxidant, showed that the electronodonor substituents accelerate the aniline carbonylation reaction, when the reaction is conducted in the presence of oxygen. For nitrobenzene used as an oxidant in this reaction substituent was found to have no effect on the carbamate yield. The nitrobenzene reduction is the rate-determining step in the aniline carbonylation process.

[1] F. Paul; Coordination Chem. Rev., 203, (2000), 269

[2] F. Ragaini, S. Cenini; J. Mol. Catal., 109, (1996), 1.

[3] J. Skupińska, M. Karpińska, Appl. Catal. A 267 (2004), 59

### 3Po-Po27

#### NOVEL BIOCOMPATIBLE ZWITTERIONIC MATERIALS

P. KASÁK<sup>1</sup>, Z. KRONEKOVÁ<sup>1</sup>, M. STACH<sup>1</sup>, D. CHORVÁT<sup>1</sup>, I. LACÍK<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ústav polymérov, Slovenská Akadémia Vied, Dúbravská cesta, SK-84236 Bratislava, Slovenská republika

<sup>2</sup>Polymer Institute of SAS, Dúbravská cesta 9, 84236 Bratislava

Korešpondenčný autor: peter.kasak@savba.sk

Major problem in the clinical results of implanted sensoric devices, such as glucose sensors, is progressive loss of the sensor output. The biofouling of proteins at the

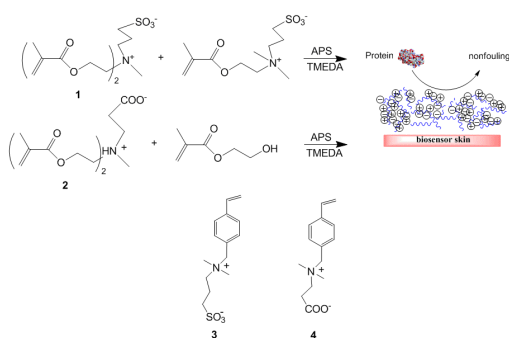
implant surface and chemical reaction due to inflammation are disturbing factors. In order to build the surface of a device with optimal properties, the minimum non-specific adsorption of proteins is required. Various zwitterion materials are known as candidates for significantly reduced protein adsorption due to their electrostatic interaction [1].

Novel synthetic cross-linkers with zwitterionic character such as sulfobetain **1** and carboxybetaines **2** were synthesized for preparation hydrogels, which structure is similar to zwitterionic monomers. Hydrogels were formed from monomer and cross-linker by free-radical polymerization using ammonium persulfate and tetramethylethylene diamine as a redox couple. Prepared hydrogels were characterized by different analytical techniques (FTIR, mechanical properties, swelling capacity, diffusion properties and transparency). The biocompatibility was tested *in vitro* using proteins bovine serum albumin-fluorescein labeled and fibrinogen-Alexa Fluor 546 labeled as the proteins and RAT-2- fibroblast as the cells.

Additionally, styrenes containing biocompatible sulfobetaine **3** and carboxybetaine **4** side chains were synthesized and polymerized. *In vitro* tests showed that biocompatibility can be tuned by employing polymers of different composition.

This work was supported by the Sixth Framework Program of the EU, IP-031867, P. Cezanne and by the Slovak Research and Development Agency under the contract No RPEU-0007-06.

- [1] a) Zhang, Z.; Chen, S.; Chang, Y.; Jiang, S. J. Phys. Chem. B, 2006, 110, 10799; b) Lowe, A. B.; McCormick, C. L. Chem. Rev. 2002, 102, 4177.



### 3Po-Po28

#### BIODISTRIBUCE MONOKLONÁLNÍ PROTILÁTKY TU-20 A JEJÍHO SCFV FRAGMENTU ZNAČENÉHO 123I V MYŠÍM ORGANISMU ZOBRAZENA POMOCÍ SPECT

V. KLEINOVÁ

ČVUT v Praze, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ÚJF AV ČR, v. v. i., Řež

Korešpondenčný autor: kleinovav@seznam.cz

Tubulin predstavuje protein, ktorý tvoří stavební jednotku cytoskeletu. Jednou z podjednotek tubulinu je III beta-tubulin, který se vyskytuje téměř výhradně v cytoskeletu nervových buněk. V místě jejich degradace se hromadí, což ho předurčuje k perspektivnímu využití jako markeru pro rozpad neuronů. TU-20 je myší monoklonální protilátka (IgG1) o relativní molkulové hmotnosti 150 kDa specificky syntetizovaná proti C- konci lidské třídy III beta-tubulinu. ScFv TU-20 je rekombinantní protein exprimovaný E. coli se zachovanými imunospécifickými a imunoreaktivními vlastnostmi. Jeho nižší molkulová hmotnost 27.7 kDa mu umožňuje výrazně lepší mobilitu a prostupnost přes hematoencefalickou bariéru. Optimálním detekčním nástrojem pro sledování osudu potenciálního diagnostického či terapeutického preparátu v organismu je značení biomolekul radioizotopem vhodných vlastností. 123I se ve velké míře využívá pro diagnostiku *in vivo* díky relativně krátkému poločas (13.3 h). Vhodná energie gama linky (159 keV) ho předurčuje k využití pro SPECT kameru. Jodace protilátky a jejího fragmentu probíhala za pomoci oxidace chloraminem-T. Preparát byl myším aplikován *i.v.* do ocasní žíly. U 123I-scFv byly zvoleny kinetické intervaly vzhledem k předchozím biodistribučním preparacím (poločas eliminace je cca 1.4 h) 0,5, 1, 2, 3 h, u 123I-TU-20 byla kinetika pomalejší a časové intervaly v rozmezí 1, 2, 3, 6 h. Z výsledků je patrný významný rozdíl v biodistribuci obou preparátů. Aktivita navázaná na scFv se z krevního oběhu primárně distribuuje do štítné žlázy a trávicího ústrojí (žaludku, střev). Rychle prochází ledvinami a je vylučována močí. Po třech hodinách je nejvýraznější akumulace aktivity ve štítné žláze, v močovém měchýři a v játrech, která představují důležitý orgán v biotransformaci léčiv. Zobrazení distribuce 123I-TU-20 poskytuje nejednoznačně interpretovatelné výsledky, neboť aktivita je akumulovaná v hrudní a břišní oblasti a rozlišení obrázků ze SPECT neumožňuje podrobnější identifikaci jednotlivých orgánů. Z preparativních distribucí TU-20 víme, že v prvních šesti hodinách je aktivita distribuována mezi plíce, srdce, játra, žaludek a střeva. Narozdíl od scFv fragmentu se aktivita neakumuluje ve štítné žláze. Není patrný močový měchýř, což potvrzuje vyhodnocení krevní clearance (poločas eliminace rychlejší fáze je cca 8h), že v prvních šesti hodinách dochází k distribuci preparátu do periferních kompartmentů. Měření probíhalo na SPECT kameře s MEGP kolimátorem a bylo provedeno na 1. LFUK v Praze.

Studie byla vypracována za finanční podpory projektů EUREKA (E!3177 - DIAGIM (IP040E167) a E!2510 -NEUROTUB (0E91) ) a projektu Grantové agentury Akademie věd České republiky (IBS1048301).

- [1] Dráberová, E., Lukáš, Z., Ivanyi, D., Viklický, V.,



Dráber, P., 1998. Expression of class III beta-tubulin in normal and neoplastic human tissues. *Histochem. Cell. Biol.* 109, 231-239.

- [2] Holliger, P., Hudson, P.J., 2005. Engineered antibody fragments and the rise of single domains. *Nat. Biotechnol.* 23, 1126-1136.
- [3] Robles, A. M., Balter, H.S., Oliver, P., Welling, M.M., Pauwels, E.K., 2001. Improved radioiodination of biomolecules using exhaustive chloramine-T.

### 3Po-Po29

#### PŘÍPRAVA 4-BENZYLSULFANYLPYRIDIN-2-KARBOXYLOVÝCH KYSELIN JAKO MEZIPRODUKTŮ ANTIMYKOBAKTERIÁLNĚ AKTIVNÍCH LÁTEK

V. KLIMEŠOVÁ<sup>1</sup>, P. HERZIGOVÁ<sup>1</sup>, J. MATYK<sup>1</sup>, J. KAUSTOVÁ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Karlova v Praze, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Katedra anorganické a organické chemie

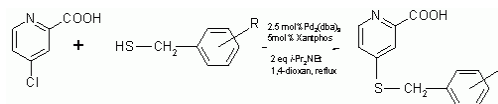
<sup>2</sup>Národní referenční laboratoř pro *Mycobacterium kansasii*, Zdravotní ústav se sídlem v Ostravě

Korešpondenční autor: vera.klimesova@faf.cuni.cz

Naše pracoviště se dlouhodobě zabývá vývojem antimykobakteriálně aktivních látek. Jednou ze studovaných skupin látek jsou funkční deriváty pyridinkarboxylových kyselin substituované benzylsulfanylovou skupinou. Toto sdělení se zabývá syntézou 4-benzylsulfanylpyridin-2-karboxylové kyseliny substituované na benzylové části molekuly. Byly studovány různé metody přípravy sulfidů, jako nejvhodnější metoda byl zvolen palladiem katalyzovaný cross-coupling 4-chlorpyridin-2-karboxylové kyseliny s různě na fenylu substituovanými fenylmethanthioly [1]. Připravené látky jsou meziprodukty pro přípravu amidů a hydrazidů. Konečné produkty syntézy, tj hydrazidy a amidy jsou testovány v podmínkách in vitro proti kmenům *Mycobacterium tuberculosis* a potenciálně patogenním kmenům mykobakterií - *M. avium* a *M. kansasii* (v Šulově půdě mikrometodou pro stanovení minimální inhibiční koncentrace (MIC) vyjádřené v  $\mu\text{M}$ –mol/l. V příspěvku budou řešeny vztahy mezi strukturou a biologickou aktivitou látek.

Problematika příspěvku byla řešena za podpory výzkumného záměru MSM 0021620822.

- [1] Itoh, T., Mase, T.: A General Palladium-Catalyzed Coupling of Aryl Bromides/Triflates and Thiols. *Org. Lett.*, 6(24), 4587-4590 (2004)



### 3Po-Po30

#### POLYMEREM MODIFIKOVANÉ VEKTORY PRO DOPRAVU GENOVÉ INFORMACE

L. KOSTKA, V. ŠUBR, R. LAGA, K. ULBRICH

Ústav makromolekulární chemie, Akademie věd České republiky, Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6

Korešpondenční autor: kostka@imc.cas.cz

Tato studie se zabývá přípravou a povrchovou modifikací polyelektrolytových komplexů DNA s polykationty (PEK), navržených jako nevirální vektory pro dopravu genové informace in vivo. PEK byly připraveny kondensací telecí brzlíkové DNA jako modelu genu a hydrofilního polykationtu ve vodném roztoku. Všechny PEK byly připraveny s poměrem nábojů  $+/- = 2:1$ . Takto připravený komplex je schopen ochránit DNA před degradací průběhu transportu organizmem, je však rozpoznáván makrofágy, interaguje s krevními proteiny a je zachycován i buňkami retikuloendoteliálního systému. Již dříve bylo ukázáno, že úprava povrchu nanočástic hydrofilním polymerem vede k omezení jejich interakcí s biologickým prostředím a k prodloužení cirkulaci v krevním řečišti. Povrchová modifikace (coating) PEK byla uskutečněna pomocí hydrofilních kopolymerů na bázi N-(2-hydroxypropyl)metakrylamidu (HPMA), které snižují imunogenicitu a zlepšují biokompatibilitu takových kopolymerem modifikovaných biologicky aktivních molekul. Pro účely povrchové modifikace DNA vektorů byly vyvinuty nové reaktivní kopolymery obsahující mezireaktivní skupinu a polymerem reduktivně štěpitelnou disulfidovou vazbu. Tato vazba umožní, že po povrchové modifikaci je polymer připojen ke komplexu prostřednictvím spojky degradovatelné pouze v reduktivním prostředí, celý vektor je v průběhu transportu stabilizován polymerem, a až po extravasaci průniku chráněného vektoru do buňky endocytosou dojde k uvolnění polymeru z povrchu vektoru, díky reduktivnímu prostředí cytoplasmy.

Inkubace modifikovaných PEK v roztoku o fyziologické koncentraci redukované formy L-glutathionu (model vnitřního prostředí buňky) nebo dithiothreitolu potvrdila předpoklady a skutečně vedla k rozštěpení disulfidové vazby a k uvolnění polymerního obalu od komplexu, což se projevilo jak poklesem molekulové hmotnosti a snížením hydrodynamického poloměru částic, tak i snížením stability celého komplexu.

Tato práce byla podporována grantem AV ČR (KAN200200651) a grantem EU (EU GIANT No. 512087)

## 3Po-Po31

**PECTIC POLYSACCHARIDES FROM NON-UTILISED BIOMASS OF PUMPKIN (CUCURBITA PEPO VAR. STYRIACA).**Z. KOŠTÁLOVÁ<sup>1</sup>, Z. HROMÁDKOVÁ<sup>1</sup>, A. EBRINGEROVÁ<sup>2</sup><sup>1</sup>*Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava*<sup>2</sup>*Center of Excellence of the Slovak Academy of Sciences, Institute of Chemistry; 845 38 Bratislava, Slovakia*

Korešpondenčný autor: chemzuko@savba.sk

Pectin as an important structural constituent of the plant cell wall is widely used in food industry as gelling, thickening and stabilizing agent. The composition, structure and physiological properties of pectin might be influenced by conditions of extraction as well as sources, location and many other environmental factors. The most interesting are the physiological function of pectin, such as detoxicant, its blood cholesterol and glucose lowering effects, positive effect on intestinal bacteria, and antitumor activity [1].

Very little information is available concerning the physicochemical and physiological properties of pumpkin pectin. Pumpkin (*Cucurbita pepo* var. *styriaca*) is widely grown and processed in Slovakia for oil production from the seeds. The biomass produced during processing is discarded as a by-product with non adequate application. Yet, it has been shown that pumpkin is a fairly promising and interesting source of pectin [2]. Pumpkin has received considerable attention in recent years for its nutritional and health protective value of the proteins and oil from the seed as well as the polysaccharides from the fruits [3].

The aim of the present study was to use sequential extraction to separate pectic polysaccharides from pumpkin pulp using water, EDTA, dilute acid and alkali as extractants. The non-purified pectin-type polysaccharides were characterised by the yields, elementary and sugar analyses and FT-IR spectroscopy. All polysaccharide fractions contained proteins and small amount of phenolics.

*This work was financially supported by the Slovak Grant VEGA, project No. 2/6131/06.*

- [1] Jun, H., Lee, Ch., Song, G., Kim, Y.: (2006) LWT 39, 554-561
- [2] Shkodina, O., G., Zeltser, O., A., Selivanov, N., Y., Ignatov V., V.: (1998) Food Hydrocollodis 12, 313-316
- [3] Caili, F., Haijun, T., Tongyi, C., Yi, L., Quanhong, L.: (2007) Food Chemistry 100, 944-947

## 3Po-Po32

**POLYMERNÍ KONJUGÁTY PRO KOMBINOVANOU TERAPII NÁDOROVÝCH ONEMOCNĚNÍ**

H. KRAKOVÍČOVÁ, K. ULBRICH, T. ETRYCH

*Ústav makromolekulární chemie, Akademie věd České republiky, Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6*

Korešpondenčný autor: hana.krakovicova@seznam.cz

V posledních letech se ve vývoji polymerních nosičů biologicky aktivních látek (BAL) rýsuje nový trend zaměřený na tzv. „duální účinek“ - vazba dvou popřípadě více BAL na jeden polymerní nosič<sup>1</sup>. V minulosti byla v naší laboratoři připravena vodorozpuštěná polymerní kancerostatika<sup>2</sup> na bázi kopolymerů *N*-(2-hydroxypropyl)methakrylamidu (HPMA) s výraznou protinádorovou aktivitou. Využitím na míru připravených polymerních prekurzorů je možné připravit polymerní léčiva se dvěma a více různými terapeutiky vázanými na jeden polymerní řetězec. Při vhodně zvolené kombinaci terapeutik je možné předpokládat doplňující se, případně i synergický účinek při jejich působení.

V této práci prezentujeme syntézu a fyzikálně-chemickou charakterizaci dvou nových polymerních konjugátů dex-*amethasonu* (DEX). Toto léčivo patří do skupiny syntetických glukokortikoidů a používá se v běžné praxi při léčbě mnohočetného myelomu nebo hormondependetních nádorů (nádory prsu, prostaty) v kombinaci s jinými cytostatiky např. paclitaxelem nebo doxorubicinem<sup>3</sup>.

Syntéza zmíněných konjugátů zahrnuje v prvé řadě přípravu polymerního nosiče radikálovou kopolymerizací monomerů HPMA a 6-(methakryloylamino)hexanoylhydrazidu (MA-AH-NHNH<sub>2</sub>) iniciovanou 2,2'-azobisisobutyronitrilem. V druhém kroku byla modifikací primární hydroxylové skupiny DEX kyselinou 4-(2-oxopropyl)benzoovou zavedena do struktury DEX oxoskupina a tento derivát DEX byl v následujícím kroku navázán hydrazonovou vazbou na připravený polymerní nosič.

Druhý konjugát byl připraven navázáním DEX a doxorubicinu na stejný polymerní nosič obsahující hydrazidové skupiny. DOX a derivát DEX byly na polymer navázány hydrolyticky labilní hydrazonovou vazbou. Připravené konjugáty byly testovány v *in vitro* podmínkách a bylo zjištěno, že jsou poměrně stabilní v pufru při pH 7,4 modelujícím prostředí krve. Při pH 5, modelujícím prostředí endosomů nádorových buněk, se z nich uvolní cca 80 % léčiva.

*Tato práce byla podporována Akademií věd České republiky (grant č. KAN 200200651).*

- [1] Shiah J.-G., Sun Y, Kopečková P., Peterson C. M., Straight R. C., Kopeček J.: J. Controlled Release 2001, 74, 249-253.

- [2] Etrych T., Chytil P., Jelínková M., Říhová B., Ulbrich K.: *Macromol. Biosci.* 2002, 2, 43.
- [3] Skommer J., Wlodkowic D., Matto M., Eray M., Pelkonen: *J. Leukemia Research* 2006, 30, 322-331

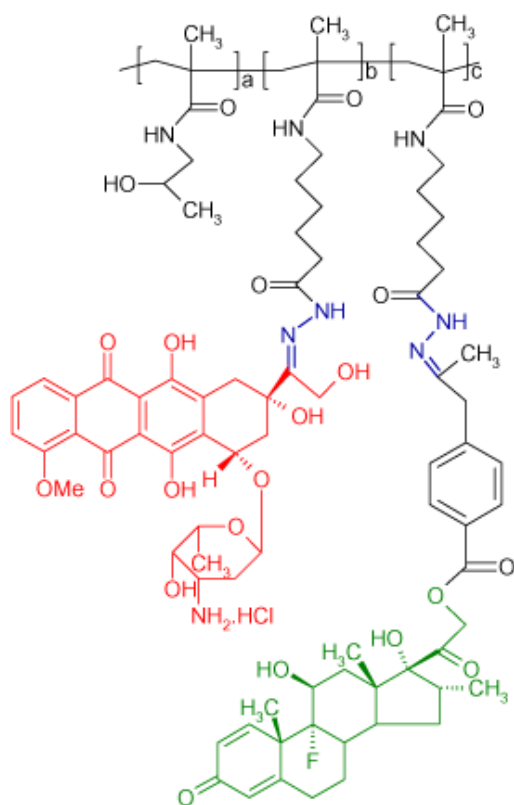


Schéma struktúry polymerného konjugátu s liečivými doxorubicínom a dexametazónom

### 3Po-Po33

#### OPTIMIZATION OF CONDITIONS TO SUPPRESS SYNERESIS AND SWELLING OF ALGINATE GELS

Z. KRONEKOVÁ<sup>1</sup>, M. DANKO<sup>1</sup>, I. KRUPA<sup>1</sup>, I. LACÍK<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ústav polymérov, Slovenská Akadémia Vied, Dúbravská cesta, SK-84236 Bratislava, Slovenská republika

<sup>2</sup>Polymer Institute of SAS, Dúbravská cesta 9, 84236 Bratislava

Korešpondenčný autor: upolzuzu@savba.sk

Alginates belong to the group of polysaccharides that are natural products of marine brown algae. There exist many types of alginates, which properties depend on the composition of the polymer. Polymer chain of alginate is composed of two monomers, the guluronic acid (G) and mannuronic acid (M). The ratio between GG blocks, MG-blocks and MM-blocks, respectively, influences the alginate properties and hydrogel formation. Alginates form a hydrogel by action of divalent cations such as calcium,

barium, strontium and others that bind preferentially to G-blocks. Gels are formed at the physiological conditions, which are highly utilized in immobilization of living cells and enzymes [1]. However, the gel formation is accompanied with several unwanted features. They are exhibited either as a shrinking accompanied with release of water (syneresis) or swelling. The aim of this study was to identify the conditions for preparation of alginate gels, which would result in minimizing both swelling and syneresis. A high-G alginate, Protanal LF 10/60 (FMC BioPolymer), was selected and gelled using method of internal gelling [2]. The influence of various factors on gel properties was investigated, which included (i) the alginate concentration, (ii) the conditions of internal gelling and (iii) the composition of gelling solution for the additional gelling step. With the change of alginate concentration, the transparency, geometry and mechanical properties are changing significantly. The increase in concentration of GDL leads to higher transparency of the gel, which was, in addition, affected also by CaCO<sub>3</sub> and alginate concentrations. In additional gelling step, the concentration of Ca<sup>2+</sup> and Ba<sup>2+</sup> gelling ions is a highly important factor for determining final syneresis and swelling properties. This work shows that using optimized conditions for preparation of alginate gels can result in minimizing of the gel syneresis and swelling properties.

*This work was supported by the Sixth Framework Program of the EU, IP-031867, P. Cezanne and by the Slovak Research and Development Agency under the contract No APVV-51-033205.*

- [1] H. Zimmermann et al. *J. Mater Sci. Mater Med.* 16 (2005) 491–501
- [2] Y. Morch et al. *Biomacromolecules* 7 (2006) 1471–1480

### 3Po-Po34

#### PŘÍPRAVA A BIOLOGICKÁ AKTIVITA NOVÝCH 5-SUBSTITUOVANÝCH URACILŮ

S. KŘUPKOVÁ<sup>1</sup>, J. HLAVÁČ<sup>1</sup>, L. SPÁČILOVÁ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Katedra organické chemie, PřF UP v Olomouci, Tř. Svobody 8, 771 46 Olomouc

<sup>2</sup>Přírodovědecká fakulta UK, Katedra organické chemie

Korešpondenčný autor: s.krupkova@seznam.cz

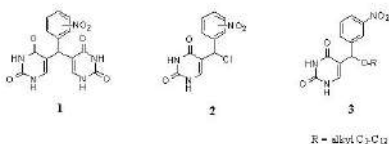
Práce je zaměřena na syntézu sloučenin obsahujících více uracilových cyklů ve své molekule. Právě takovéto sloučeniny by byly předurčeny k interakci s nukleovými kyselinami či jinými biomolekulami na více centrech nebo dvou vláknách šroubovice.

Studovány byly reakce uracilu s nitrobenzaldehydem a to se všemi třemi polohovými izomery vedoucí ke sloučeninám typu **1**, **2**, **3**.

Průběh reakce byl ovlivňován zvolenými reakčními podmínkami, které byly podrobněji studovány u reakce s 3-nitrobenzaldehydem. V závislosti na zvolených reakčních podmínkách byl získán buď dvoujaderný derivát **1** nebo chlorderivát **2**, který v alkoholu poskytl příslušný éter **3**. Na výsledek reakce měla vliv také polohová izomerie u nitrobenzaldehydu. Zatímco m- a p-izomery poskytovaly analogické produkty **1** a **2**, reakcí s o-nitrobenzaldehydem byl získán produkt, jehož struktura je zatím v řešení.

V této práci byly sloučeniny připraveny za účelem testování na jejich biologickou aktivitu. Testována byla *in-vitro* cytotoxická aktivita na nádorových liniích a to u alkoxyderivátů **3**. Zde byla sledována závislost mezi aktivitou a délkou alifatického řetězce.

[1] Lam, B. L.; Pridgen, L. N.: J. Org. Chem. 1986, 51(13), 2592-2594



### 3Po-Po35

#### BIODISTRIBUCE TERMORESPONSIVNÍHO POLYMERU ZNAČENÉHO <sup>131</sup>I V MYŠÍM ORGANISMU

J. KUČKA<sup>1</sup>, M. HRUBÝ<sup>2</sup>, J. KOZEMPEL<sup>1</sup>, O. LEBEDA<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústav jaderné fyziky, Akademie věd České republiky, 250 68 Řež u Prahy

<sup>2</sup>Ústav makromolekulární chemie, Akademie věd České republiky, Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6

Korešpondenční autor: jkucka@centrum.cz

Termoresponsivním polymerům s teplotou fázové separace blízkou teplotě lidského těla bylo v poslední době věnováno mnoho pozornosti pro jejich možné využití v medicíně. Jednou takovou aplikací může být lokální radioterapie radionuklidově značeným termoresponsivním polymerem. Výhodou termoresponsivních vlastností nosiče radionuklidu pro tuto aplikaci je, že při vhodném nastavení teploty fázové separace lze nosič isotopicky značit za laboratorní teploty a aplikovat ho injekčně, přičemž na místě kam je injikován dojde vlivem teploty lidského těla k jeho fázové separaci, která pak udrží systém na místě aplikace. Při fázové separaci je ovšem vysrážená fáze v rovnováze s polymerem v roztoku a je proto otázkou, zda tato rovnováha je dostatečně pomalá na to, aby skutečně

došlo k dostatečně dlouhé retenci termoresponsivního polymeru a tím i radionuklidu na místě aplikace. To nelze uspokojivě namodelovat *in vitro*. Proto byl připraven a charakterizován modelový termoresponsivní polymer značitelný <sup>131</sup>I, poly(*N*-isopropylakrylamid-*co*-*N*-methakryloyltyrosinamid) s teplotou fázové separace 29 °C. Tento polymer byl po radiojodaci injekčně aplikován do stehenního svalu myši kmene BalbC. Pak byla sledována retence radioaktivity na místě aplikace. Cca 20 % radioaktivity je v průběhu prvních několika hodin po aplikaci vymyto z místa aplikace. Zbýlých cca 80 % radioaktivity je zadrženo v injikovaném stehenním svalu ještě po 7 dnech, což je plně postačující pro zamýšlené aplikace. Polymer, který je z místa aplikace vymyt, nemá specifickou orgánovou lokalizaci a je vyloučen močí. Lze tedy říci, že termoresponsivní polymery mají značný potenciál využití pro lokální radioterapeutické aplikace.

Studie byla vypracována za finanční podpory Grantové agentury Akademie věd České republiky (grant č. A400480616).

### 3Po-Po36

#### SYNTÉZA 6A,6D-DISULFANYL-DERIVÁTU A-CYKLODEXTRINU A JEHO VYUŽITÍ PRO PŘÍPRAVU CYKLODEXTRINOVÉHO DUPLEXU.

L. KUMPRECHT<sup>1</sup>, M. BUDĚŠÍNSKÝ<sup>2</sup>, T. KRAUS<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Přírodovědecká fakulta UK, Albertov 6, Praha 2, ; Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, Flemingovo náměstí 2, Praha 6

<sup>2</sup>Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, Flemingovo nám. 2, 166 10, Praha 6

Korešpondenční autor: kumprecht@uochb.cas.cz

Cílem práce bylo vypracování metodiky přípravy rigidního duplexu  $\alpha$ -cyklodextrinu, v němž jsou kavity spojeny prostřednictvím dvou disulfidických můstků v polohách C(6<sup>A</sup>), C(6<sup>D</sup>) a C'(6<sup>A</sup>), C'(6<sup>D</sup>).

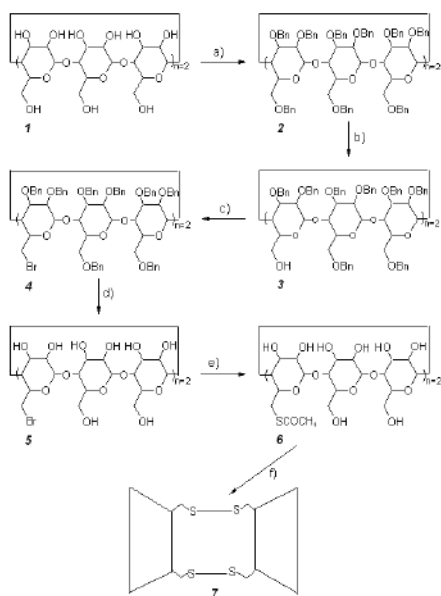
Jako stavební blok pro konstrukci dimeru byl použit derivát  $\alpha$ -cyklodextrinu **6** s thioacetylovými skupinami v polohách C(6<sup>A</sup>), C(6<sup>D</sup>). Selektivní debenzylací perbenzylovaného  $\alpha$ -cyklodextrinu<sup>1</sup> ve výše zmíněných polohách pomocí DIBAL-H byl získán diol **3**. Po následné transformaci na dibromid **4** a totální debenzylaci hydrogenací byl získán dibromid **5**. Thioacetylové skupiny byly zavedeny reakcí s thioacetátem draselným **6**.

Hydrolyzou thioacetylových skupin ve vodném roztoku amoniaku byly *in situ* generovány thiolové skupiny a za přítomnosti vzdušného kyslíku došlo k oxidativnímu spojení na dimer **7**.

Při studiu komplexace alifatických nasycených diolů dimerem **7** pomocí titrační mikrokolorimetrie bylo zjištěno, že 1,12-dodekandiol vytváří inkluzní komplex s konstantou stability  $K_{as}$   $1.2 \times 10^8 \text{ M}^{-1}$  a 1,14-tetradekandiol  $10^9 \text{ M}^{-1}$ .

Školiteli Tomáši Krausovi a Miloši Buděšinskému za NMR analýzy.

- [1] Lecourt T., Herault A., Pearce A. J., Sinay P.: Chem - Eur. J. 2004, 10, 2960-2971



a) BrCl, DMSO, NaH, 4 hod., 95 % b) DIBAL 3M, 31 ekv., 3 hod., 87 % c) CBr<sub>4</sub>, PPh<sub>3</sub>, DMF, 12 hod., 60 °C, 92% d) H<sub>2</sub>, Pd/C, 40 atm., 4 hod., DMF/EtOH, 92 % e) AcSK, DMF, 6 hod., 90 % f)  $\text{C}_{60}\text{H}_{12}\text{O}_6$ : 5 x 10<sup>-9</sup> M, NH<sub>3</sub> 1 M eq., 60 % MeCN, [C], 48 hod., 95 %

## Reakční schéma

### 3Po-Po37

## NEW CANCEROSTATICS AND ANTI-ANGIOGENICS POSSESSING PYRANO[3,2-C]CHROMEN-2(5H)-ONE LEADING STRUCTURE - THE SYNTHESIS AND BIOLOGICAL ACTIVITY

L. KUŠNIEROVÁ<sup>1</sup>, S. KOVÁČOVÁ<sup>1</sup>, M. ŠEBESTA<sup>2</sup>, A. BOHÁČ<sup>1</sup>, M. LÁCOVÁ<sup>1</sup>, M. SALÍŠOVÁ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Katedra organickej chémie, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava

<sup>2</sup>Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Katedra biochémie, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava

Korešpondenčný autor: kusnierova@fns.uniba.sk

Recently, we have uncovered a new leading structure possessing 3-arylpyrano[3,2-c]chromen-2(5H)-one skeleton with promising anti-tumor activity. (Picture 1) [1] The new compounds based on this structure were synthesized by condensation of 4-oxo-4H-chromene-3-carbaldehydes with derivatives of 2-arylacetic acids. Biological activities of these heterocyclic compounds were determined on a panel of 60 human tumor cell lines in the cooperation with the *National Cancer Institute* in USA ( $GI_{50}$  = 10e-5 - 10e-8 M). [2] Angiogenesis, new blood vessel

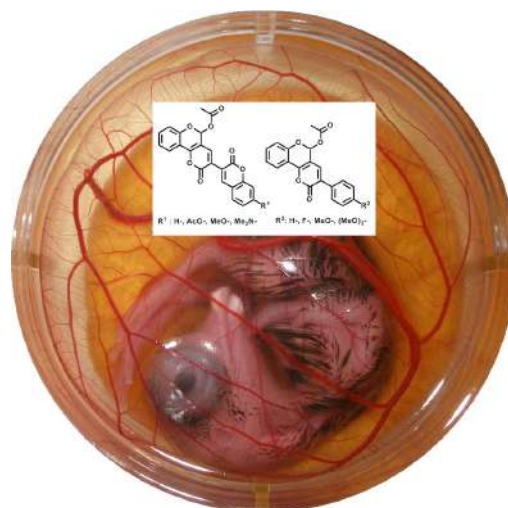
formation, is a promising way to treat cancer by inhibition of neovascularization. [3] *Avastin* (*Bevacizumab*, humanized antibody against *Vascular Endothelial Growth Factor*) was the first approved anti-angiogenic drug by FDA USA in 2004. *Avastin* has showed significant prolongation of survival in cancer patients. Anti-angiogenic CAM assay (Chick Chorioallantoic Membrane) carried out on the developing embryos of *Japanese quail* was recently introduced for our research purposes. (Picture 1) [4] An anti-angiogenic efficiency of the new anticancer compounds is being evaluated.

*This work has been supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract APVT-20-031904, APVV LPP-0153-06 and UK/146/2007. This work was also supported by the COST European project Action CM0602 in a form of an international cooperation and knowledge dissemination*

- [1] Lácová, M.; Boháč, A. Proprietary application 2006, No. PP5006 - 2006.

[2] <http://www.cancer.gov/newscenter>

- [3] <http://nci.nih.gov/cancertopics/UnderstandingCancer/angiogenesis> and Folkman, J. *Angiogenesis Ann. Rev. Med.* 57, 2006, 1 - 18. [4] Quesada A.R.; Munoz-Chapuli, R.; Medina, M.A. *Anti-angiogenic drugs: from bench to clinical trial Med. Res. Rev.* 26, 2006, 483-530.



Picture 1: New anticancer and anti-angiogenic compounds with 3-aryl pyrano[3,2-c]chromen-2(5H)-one leading skeleton. CAM assay (Chick Chorioallantoic Membrane) carried out on the developing embryos of *Japanese quail*.



## 3Po-Po38

**TEORETICKÉ STUDIUM KOMPLEXACE  
POLYFLUOROVANÝCH  
TRIPYRAZOLYLMETHANŮ**

J. KVÍČALA, M. RYBÁČKOVÁ, M. SKALICKÝ, P. BEČVAŘÍK

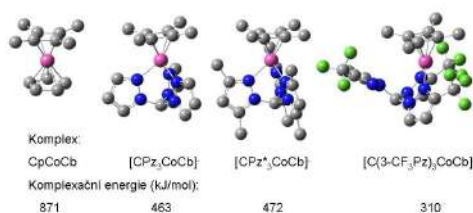
Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav organické chemie,  
Technická 5, 166 28 Praha 6

Korešpondenčný autor: kvicalaj@vscht.cz

Škorpionáty a tripyrazolymethany jsou poměrně novou skupinou heterocyklických ligandů isoelektronických s cyklopentadienidovými anionty. V kontrastu k cyklopentadienům umožňují regioselektivní modifikaci jak na centrálním atomu, tak na heterocyklických kružích. Paralelně k experimentálnímu studiu tripyrazolymethanů modifikovaných polyfluoralkylovými substituenty jako nových typů ligandů pro fluorovou chemii jsme zahájili teoretický výzkum jejich komplexace pomocí ab initio a DFT metod. Náš zájem se orientoval do dvou odlišných oblastí: a) studium isometalocenů obsahujících tripyrazolymethanový (CPz3) a čtvercový cyklobutadienový (Cb) ligand; b) studium komplexace substituovaných tripyrazolymethanů s povrchem Au(111). Literární údaje o isometalocenových komplexech obsahujících tripyrazolymethanový a cyklobutadienový skelet jsou velmi skoupé [1]. Výpočty kobaltových komplexů tetramethylcyklobutadienu s různě substituovanými tripyrazolymethany DFT metodou PBE1PBE/6-311G(d) zohledňující BSSE ukázaly, že komplexace cyklobutadienu je pro tripyrazolymethanové komplexy ve srovnání s cyklopentadienidy slabší a velmi citlivá na sterické bránění. Zavedení trifluormethylové skupiny do polohy 3 heterocyklického kruhu tak vede ke ztrátě trikoordinace k tripyrazolovému ligandu. Výpočty koordinací ke zlatým povrchům byly vedeny dvěma směry, a to jednak k nalezení vhodného modelu zlatého povrchu, jednak vzhledem k značné velikosti polyfluoralkylovaných tripyrazolových ligandů ke studiu pomocí vícevrstvé výpočetní metody ONIOM.

Děkujeme Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (Výzkumné centrum LC06070, Výzkumný záměr č. 6046137301) za finanční podporu tohoto projektu

- [1] O'Sullivan, D. J.; Lalor, F. J. J. *Organomet. Chem.* 1973, 57, C58.



Komplexační energie isometalocenů na bázi tripyrazolymethanů a tetramethylcyklobutadienu

## 3Po-Po39

**ELECTROGRAFTING OF POLYMERS ONTO  
ELECTROCONDUCTIVE SUBSTRATE AS A  
TOOL FOR FORMATION OF NON-BIOFOULING  
SURFACES FOR BIOMEDICAL APPLICATIONS**
M. STACH<sup>1</sup>, P. KASÁK<sup>1</sup>, I. LACÍK<sup>2</sup><sup>1</sup>Ústav polymérov, Slovenská Akadémia Vied, Dúbravská cesta, SK-84236 Bratislava, Slovenská republika<sup>2</sup>Polymer Institute of SAS, Dúbravská cesta 9, 84236 Bratislava

Korešpondenčný autor: upollaci@savba.sk

Biofouling is the undesirable accumulation of proteins and cells on the surfaces of implanted biomaterials. Currently biofouling represents one of the major problems in such biomedical applications where the diffusion properties have to be controlled in the long-term applications (sensors, membranes). The adsorption of proteins onto surface of biosensors followed by changing of their conformation and subsequent adsorption of cells leads to the reduced diffusion of nutrients and/or analytes [1]. Several ways for reducing the biofouling of biosensors are known, which include grafted hydrophilic polymers as well as polymers bearing zwitterionic group. Electrografting is a relatively new and powerful technique for modifying electroconductive surfaces with organic material. Electrografting is an electro-initiated process which requires a charged electrode. It is based on direct initiation via electron transfer to a monomer which forms a radical anion. The cathodic electrografting of different monomers, for example various methacrylates and acrylates, allows for formation of thin polymer films, which are generally insulating, highly adherent and optically transparent. The unique feature of this technique is in controlling the density, polymer chain length and, by selection of monomers, chemical character of the polymer layer attached to a surface. A very stable polymer/metal interface produced by the cathodic electrografting is due to formation of metal-carbon chemical bonds [2]. Electrografting is thus very suitable for covalent attachment of various polymers onto the conductive surfaces, which by themselves or after the appropriate chemical modification can exhibit required non-biofouling properties. The electrografting of poly(dimethylamino)ethylmethacrylate onto Si wafer and stainless steel electrode was performed in a glove-box under inert dry nitrogen atmosphere from 3 M solution of (dimethylamino)ethylmethacrylate in dimethyl formamide containing 0.05 M of tetrabutylammonium perchlorate as supporting conductive salt. The specific cathodic potential -1.8 V was applied in several cycles at scan rate 20 mV.s<sup>-1</sup> using potentiostat PAR 273A. The electrografted film was characterized by ATR-FTIR and subsequently modified to poly(sulfobetaine methacrylate) or poly(carboxybetaine methacrylate) in

order to obtain the non-biofouling surfaces.

*This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. RPEU-0007-06 and by Sixth Framework Program of the EU, IP-031867, P. Cezanne.*

- [1] N. Wisniewski, M. Reichert, *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces* 18, 197 (2000)
- [2] C. Bureau, D.P. Chong, G. Lécayon, J. Delhalle, J. *Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* 83, 227 (1997)

### 3Po-Po40

#### ENCAPSULATION OF ISLETS OF LANGERHANS IN POLYMERIC MICROCAPSULES

G. KOLLÁRIKOVÁ<sup>1</sup>, I. LACÍK<sup>1</sup>, V. ŠTRBÁK<sup>2</sup>, Z. BAČOVÁ<sup>2</sup>, D. HUNKELER<sup>3</sup>, M. QI<sup>4</sup>, J. OBERHOLZER<sup>4</sup>, P. MICHALKA<sup>5</sup>, D. CHORVÁT JR.<sup>6</sup>, J. PODSKOČOVÁ<sup>6</sup>

<sup>1</sup>*Polymer Institute of SAS, Dúbravská cesta 9, 84236 Bratislava*

<sup>2</sup>*Institute of Experimental Endocrinology of SAS, Vlárská 3, 83306 Bratislava*

<sup>3</sup>*AQUA+TECH Specialties S.A., CH-1283 La Plaine, Geneva*

<sup>4</sup>*UIC, Division of Transplantation, 840 South Wood Street CSB, Chicago, IL 60612*

<sup>5</sup>*Faculty of Medicine, Comenius University, Špitálska 24, 81372 Bratislava*

<sup>6</sup>*International Laser Center, Ilkovičova 3, 81219 Bratislava*

Korešpondenčný autor: [upollaci@savba.sk](mailto:upollaci@savba.sk)

Transplantation and immunoprotection of pancreatic islets of Langerhans in microcapsules made by polyelectrolyte complexation seem to represent the promising encapsulation principle and shows potential to the final cure of type 1 diabetes mellitus. The advantages of this approach applied to the cell encapsulation include short reaction and processing time at ambient or lower temperature, thereby providing a high microcapsule production rate as well as gentle and well-controlled manipulation with cells. The polyelectrolyte complex based microcapsule made of polyanions sodium alginate (SA), sodium cellulose sulfate (CS) and polycation poly(methylene-co-guanidine)hydrochloride (PMCG) represents the composition and processing conditions with high potential in the bioencapsulation application [1,2].

The main aim of this contribution is to present the results about encapsulation of human islets of Langerhans in SA–CS/PMCG microcapsules and transplantation to the peritoneal cavity of diabetic animals. The human islets used for the rodent studies were delivered from University of Illinois as a part of the Chicago Project activities [3]. SA–CS/PMCG microcapsules explanted from peritoneal cavity of Wistar rats after 5 months showed that MWCO decreased from 25 to about 10 kDa, determined by dextrans. The reason for this could be only a few

micrometer thick collagen layer detected on the microcapsule surface by immunohistochemical analysis. The rupture load of microcapsule before transplantation and of microcapsules retrieved after 5 months from peritoneal cavity of rats did not differ significantly. This data indicate on both mechanical and chemical stability under *in vivo* conditions. Islets after transport maintained viability and diabetes was reversed for 2 to 3 months in Wistar rats.

*This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No APVV-51-033205 and by the Chicago Project coordinated by the University of Illinois at Chicago and the Christopher Foundation.*

- [1] I.Lacík, M. Briššová, A.V.Anilkumar, A.C.Powers, T.G. Wang. *J. Biomed Mater Res.* 39 (1998) 52.
- [2] T.G. Wang, I.Lacík, M. Briššová, A.V.Anilkumar, A. Prokop, D. Hunkeler, R. Green, K. Shahrokhi, A.C.Powers. *Nature Biotechnol.* 15, (1997), 358
- [3] [www.thechicagoproject.org](http://www.thechicagoproject.org)

### 3Po-Po41

#### SYNTÉZA ORGANICKÉHO INHIBÍTORA ANGIOGENÉZY - POTENCIÁLNEHO LIEČIVA S ANTITUMOROVOU AKTIVITOU

L. LINTNEROVÁ, A. BOHÁČ, M. SALIŠOVÁ

*Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Katedra organickej chémie, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava*

Korešpondenčný autor: [lucialintnerova@yahoo.com](mailto:lucialintnerova@yahoo.com)

Rozvoj tumoru a metastáz v organizme je podmienený jeho zásobovaním krvou. Tumory sú angiogénne závislé. Anti-angiogeniká sú zlúčeniny brániace vzniku a vývoju nových ciev v okolí tumoru. Pôsobia viacerými mechanizmami: napr. inhibujú komunikáciu medzi rakovinovými a endoteliálnymi bunkami, môžu inhibovať proteolytické enzýmy potrebné pre dezintegráciu extracelulárnej matrice (vytvárajúce priestor pre nové cievy), môžu vyvolávať aj reverznú depolymerizáciu mikrotubúl aktivovaných endoteliálnych buniek (s cieľom dočasného zastavenia resp. zníženia prietoku v cievach tumoru), alebo znižujú tvorbu krvných doštičiek obsahujúcich veľké množstvo rastových faktorov, ktoré tumor využíva na medzibunečnú signalizáciu. Anti-angiogeniká sú účinné v kombinácii s klasickou chemoterapiou pri liečbe onkologických pacientov a predstavujú nový spôsob liečby tumorov a metastáz.

Uskutočnili sme syntézu inhibítora angiogenézy *N*-[5-(etyl-sulfonyl)-2-metoxifynyl]-5-[3-(pyridín-2-yl)fenyl]oxazol-2-amínu (**10**) (Schéma 1). [1]

Zlúčenina **10** je známa ako inhibítor kinázovej časti transmembránového receptora VEGFR-2 endoteliálnych

buniek (tvoriacich vnútornú výstelku steny ciev). Látka **10** bráni aktivovaniu endoteliálnych buniek a ich deľeniu blokováním funkcie VEGFR-2 receptora ktorý viaže rastový faktor VEGF (Vascular Endothelial Growth Factor) vysielaý tumorom a je v neinhibovanej forme zodpovedný za aktiváciu angiogenézy.

Nedávno objavenú aktívnu zlúčeninu **10** sme sa rozhodli pripraviť z dvoch dôvodov. Prvým je potreba tejto látky ako štandardu pre biologické testovanie na CAM membráne embrya prepelice japonskej, ktoré uskutočňujeme na našom pracovisku. Druhým dôvodom je možnosť predikovanej funkcionalizácie skeletu s cieľom pripraviť nový na mieru šitý inhibítor pomocou Click Chemistry metodológie.

*Za finančnú podporu ďakujeme Agentúre na podporu výskumu a vývoja na základe Zmluvy č. APVT-20-031904. This work was supported by the COST European project Action CM0602 in a form of an international cooperation and knowledge dissemination.*

- 1 Harris, P.A., Cheung, M., Hunter III., R.N., Brown, M.L., Veal, J.M., Nolte, R.T., Wang, L., Liu, W., Crosby, R.M., Johnson, J.H., Epperly, A.H., Kumar, R., Luttrell, D.K., Stafford, J.A.: *J. Med. Chem.* 48, 1610 - 1619 (2005).

### 3Po-Po42

#### STRUCTURE, ELECTRONIC AND OPTICAL CHARACTERIZATION OF OLIGOTHIOPHENES TERMINATED WITH (9H-FLUOREN-9-YLIDENE)METHYL CHROMOPHORES

V. LUKEŠ<sup>1</sup>, M. MATIS<sup>2</sup>, D. VÉGH<sup>3</sup>, P. HRDLOVIČ<sup>4</sup>, V. LAURINC<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemical Physics, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava

<sup>2</sup>Department of Physical Chemistry, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava

<sup>3</sup>Department of Organic Chemistry, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava,

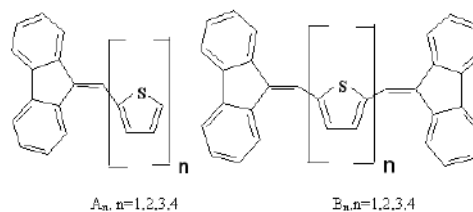
<sup>4</sup>Ústav polymérov, Slovenská Akadémia Vied, Dúbravská cesta, SK-84236 Bratislava, Slovenská republika

Korešpondenčný autor: [vladimir.lukes@stuba.sk](mailto:vladimir.lukes@stuba.sk)

The synthesis, spectral measurements and the theoretical study of oligothiophenes terminated with (9H-fluorene-9-ylidene)methyl chromophores at the one (series A<sub>n</sub>) and both (series B<sub>n</sub>) ends are presented. The electron absorption and fluorescence spectra of prepared molecules were measured in polymer matrices and chloroform solution. The absorption and fluorescence spectra of the investigated systems are represented by broad band without vibrational structure. Well detectable fluorescence is observed for the compounds of the B<sub>n</sub> family. The experimentally observed medium large Stokes shifts (less than

5000 cm<sup>-1</sup>) indicate restricted geometrical changes in molecular chain upon the optical excitation. Experimental lifetimes of fluorescence are shorter than 1 ns. Theoretical calculations have been performed at the density functional theory (DFT) and semiempirical Austin Model 1 (AM1) levels of the theory. The calculated electronic spectra and the theoretical effective conjugation length (estimated maximal number of repeat units are 11 for A<sub>n</sub> and 9 for B<sub>n</sub>) are in agreement with experimental expectations. The changes in planarity between the fluorene and thiophene chromophores upon the excitation are also theoretically characterised.

*This work has been supported by Slovak Grant Agency VEGA (Projects No. 1/3036/06, 2/6015/26, 1/2021/05).*



Structure of fluorene - thiophene adducts

## Postery – sekcia 4

### 4Po-Po1

#### METHANOLOVÉ PALIVOVÉ ČLÁNKY VE VÝUCE CHEMIE

P. OPATRŇÝ<sup>1</sup>, M. BÍLEK<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Karlova, Přírodovědecká fakulta, Katedra učitelství a didaktiky chemie

<sup>2</sup>Univerzita Hradec Králové

Korešpondenčný autor: [Pavel.Opatrny@atlas.cz](mailto:Pavel.Opatrny@atlas.cz)

Všeobecné vzdelávanie prochází v České republice v poslední době řadou změn týkajících se jak její metodické, tak i obsahové stránky. Jednou z cest inovace školního kurikula je možná orientace na nové materiály a technologie využitelné v každodenním životě. K těmto oblastem lze s jistotou přiřadit i problematiku různých typů palivových článků. Pro školní demonstrační a frontální experimenty se jeví jako nejvhodnější modely nízkoteplotních „kyslíkovodíkových“ [1] a „methanolových“ palivových článků, které dodává např. firma HELIOCENTRIS (<http://www.heliocentris.com>). Modely palivových



článků pro přímou reakci methanolu (DMFC - Direct Methanol Fuel Cell) se zdají být pro učitele chemie bezpečnější alternativou, kdy nehrozí riziko výbušnosti směsi vodíku se vzdušným kyslíkem. V teoretické části je nutno studentům vysvětlit průběh elektrochemických reakcí jako v případě PEM kyslíko-vodíkových palivových článků, a uvést možné výhody a nevýhody vyplývající z rozdílu těchto zařízení. Pro experimentální část navrhujeme tři modelové experimenty s DMFC. Cílem prvního (Charakteristika methanolového palivového článku) je stanovení voltampérové charakteristiky (výkonu) článku. Druhý experiment (Závislost výkonu palivového článku na koncentraci methanolu) demonstruje závislost voltampérové charakteristiky DMFC na různé koncentraci methanolu. Třetí experiment (Srovnání charakteristik modelu methanolového a kyslíko-vodíkového palivového článku) se snaží identifikovat rozdíly obou typů nízkoteplotních PEM palivových článků. Studenti tak na základě získaných naměřených hodnot mohou diskutovat - jednoduchost obsluhy, vliv koncentrace paliva, provozní problémy, průmyslové uplatnění a ekologické souvislosti obou typů palivových článků.

*Příspěvek je publikován s podporou projektu GAČR 406/05/0188 „Konstruktivismus a jeho aplikace v integrovaném pojetí přírodovědném vzdělávání“.*

- [1] Opatrný, Pavel, Bílek Martin. Školní experimenty s modely palivových článků. Chem-Zi, 2005, roč. I, č. 1, s. 251.
- [2] Opatrný, Pavel. Experimentální činnost ve výuce chemie na SŠ. Školní modely palivových článků. [Diplomová práce], Hradec Králové : Katedra chemie PdF UHK, 2005.
- [3] Opatrný, Pavel, Bílek, Martin. Návrh realizace a evaluace vyučovací hodiny s tématem „Palivový článek“ na základní škole. Aktuální otázky výuky chemie - XV. Mezinárodní konference o výuce chemie, 2005, s. 454-459.

#### 4Po-Po2

### PŘÍRODNÍ VĚDY HRAVĚ ANEB MINIJARMARK CHEMIE, FYZIKY A MATEMATIKY

R. MENZELOVÁ<sup>1</sup>, V. FADRŇÁ<sup>1</sup>, V. MAIER<sup>2</sup>, L. KVÍTEK<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta

<sup>2</sup>Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Tř. Svobody 8, 771 46 Olomouc

Korešpondenční autor: regina.menzelova@upol.cz

Přírodovědecká fakulta, ve spolupráci s Pedagogickou fakultou, Univerzity Palackého v Olomouci přišla s nápadem realizovat jednorázové akce, jejichž cílem je vzbudit větší zájem mládeže o přírodní vědy; akce, které

by kouzlo těchto věd dovedly mladým lidem přiblížit v celé jejich kráse. Konkrétně se jedná o „Minijarmark chemie, fyziky a matematiky“ (pod záštitou projektu STM-Morava<sup>1</sup>), jehož cílem je právě blíže představit tyto vědní obory žákům základních a studentům středních škol.

Slovo jarmark bezesporu v každém z nás evokuje představu tržičky. Tato všeobjímající představa by nebyla kompletní bez spousty křiku, dohadů, ale i zábavy. Přesně to naše jarmarky bezesporu obsahují navzdory tomu, že jsou realizovány přímo na půdě základních či středních škol. V těchto školách hostují pedagogové a studenti Univerzity Palackého v Olomouci s bohatým programem, v němž jsou zábavnou formou prezentovány poutavé chemické a fyzikální experimenty či matematické hlavolamy. Úkolem těchto popularizačních akcí je vzbudit zájem žáků a studentů o tyto předměty a především jim dokázat, že i přírodovědné obory jsou nedílnou součástí běžného života. Studenti se mají možnost stát hlavními aktéry velkého množství zajímavých pokusů, jako např. nechat si vzplát chemicky upravenou vatou na dlani, odpalovat vodíkové „minipumpy“ či střílet ze speciálních minizkumavek.

Přestože se tyto jarmarky zdají být převratnou novinkou, tato myšlenka vychází z dnes již tradičního Jarmarku chemie, fyziky a matematiky<sup>2</sup>, jež má v Olomouci, díky Univerzitě Palackého, letitou tradici. Dosud se podařilo realizovat tři „minijarmareční“ setkání<sup>3</sup> na vybraných školách Olomouckého kraje. Především díky kladné odezvě jsou naplánované podobné akce i na školní rok 2007/08.

*Autoři děkují za finanční podporu projektu MŠMT NPV II č. 2E06029 „STM-Morava“.*

- [1] STM-Morava [online]. 2006 [cit. 2007-06-07]. Dostupný z WWW: .
- [2] KLEČKOVÁ, M., BARAN, P., PETŘIVALSKÝ, M. Chemická laboratoř na náměstí - Jarmark 2005. In ChemZi. Bratislava, 2005. s. 253. ISSN 1336-7242.
- [3] Jarmark a minijarmarky [online]. 2006 [cit. 2007-06-07]. Dostupný z WWW: .



Jarmareční mumraj (Minijarmark Jeseník)

#### 4Po-Po3

### NENÍ DŮLEŽITÉ VYHRÁT, ALE STÁT SE VĚDCEM

R. FILIPOVÁ<sup>1</sup>, P. BANÁŠ<sup>2</sup>, M. OTYEPKA<sup>3</sup>, T. NEVĚČNÁ<sup>2</sup>, L. KVÍTEK<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Palackého v Olomouci, Filozofická fakulta, Katedra Psychologie

<sup>2</sup>Univerzita Palackého Olomouc, Přírodovědecká fakulta, Katedra fyzikální chemie

<sup>3</sup>Department of Physical Chemistry and Center for Biomolecular and Complex Molecular Systems, Palacky University

<sup>4</sup>Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta

Korešpondenční autor: renfi@post.cz

Přírodní vědy nepatří v současné době k těm oborům, které musí odolávat náporu zájemců. I když si tento dlouhodobý trend uvědomují pedagogové, psychologové i politici [1], řešení umožňující zvrácení tohoto trendu zatím nalezeno nebylo. Následující příspěvek se zabývá možností změny této tendence u vysokoškolské mládeže. Navazujeme na výzkum, ve kterém jsme zjistili, jaký mají studenti zájem o vědeckou činnost a zda se chtějí vědeckých soutěží účastnit. Z výsledků tohoto průzkumu jsme zjistili, že v naprosté většině se studenti chtějí soutěží účastnit a jsou ochotni pro to vyvinout vědeckou činnost. V tuto chvíli však postrádají dostatek informací a možností. Předpokládáme, že soutěžení a snaha vyhrát a zviditelnit se by mohla studenty motivovat k práci ve vědě. Každoroční soutěž může být mezníkem, ke kterému musí studenti prokázat výsledky své práce. Motivovat může prohra i výhra. Výhrou získají vysoké ocenění, pocit smysluplnosti své práce a budou se další rok snažit vynaložit podobný výkon, aby tuto odměnu získali znovu. Prohrou mohou studenti vidět cíl svojí cesty. Budou o to více motivováni k práci, když zjistí, že cenu lze získat a jak málo jim k tomu chybělo. Pokud student cenu získá po několika neúspěších, bude si jí více vážit a bude se více snažit titul vítěze obhájit. I pasivní účastníci, tedy diváci, mohou sledováním takové soutěže získat zájem o vědeckou činnost a příště se účastnit aktivně. S těmito myšlenkami jsme uspořádali

soutěž „O cenu děkana přírodovědecké fakulty UP Olomouc“. Soutěž probíhala formou reálné vědecké konference. Následný průzkum ukázal, že tato soutěž ovlivnila pohled studentů na vědeckou činnost.

Děkujeme za finanční podporu ministerstvu školství mládeže a tělovýchovy (projekt MŠMT NPV II č.2E06029)

[1] Europe needs more scientists! Report by the High Level Group on Increasing Human Resources for Science and Technology in Europe. Brussels, European Commission. ISBN 92-894-8458.

#### 4Po-Po4

### CHEMIE PRO VŠECHNY ANEB JAK INOVOVAT KURIKULUM VŠEOBECNÉHO CHEMICKÉHO VZDĚLÁVÁNÍ

M. BÍLEK

Univerzita Hradec Králové

Korešpondenční autor: martin.bilek@uhk.cz

V době probíhající kurikulární reformy vzniká v České republice nová šance pokusit se zvýšit zájem žáků o přírodovědnou výuku, o výběr dalšího studia a povolání v oblasti přírodních věd a technologie. Je možné detekovat několik linií pro inovace přírodovědné výuky v uvedeném smyslu, jako jsou:

- zájem žáků o přírodní vědy a jejich výuku (O co se zajímám?; Co se chci učit?; Co budu potřebovat?) - např. výsledky mezinárodní srovnávací studie ROSE (Relevance of Science Education) [1],
- kontext výuky (ideál - “školní věda”, aplikační kontext, společenský kontext, osobnostní kontext),
- obsah výuky (standarty; rámcové a školní vzdělávací programy; tradice; nová témata),
- kompetence (klíčové kompetence; „scientific literacy“; přírodovědné činnosti).

Aktuální cestou k inovaci všeobecného přírodovědného (včetně chemického) vzdělávání jsou i nové pohledy na diferenciaci či integraci přírodovědných poznatků v učebních plánech (učebních předmětech) [2]. Z těchto důvodů je řešen ve spolupráci Univerzity Palackého v Olomouci, Univerzity Hradec Králové a Univerzity Tomáše Bati ve Zlíně výzkumný projekt zaměřený na tvorbu didaktického systému přírodovědy pro základní školu. Ten by měl být posléze základem výukových projektů (vzdělávacích programů - např. v rámci tvorby školních vzdělávacích programů) jak s diferencovanými přírodovědnými předměty tak, a to zejména, se zařazováním integrované výuky přírodních věd. V rovině obsahových

linií vytvářeného systému jde např. o sjednocující koncepty a procesy přírodních věd, vztahy přírodních věd a technologie, historické aspekty přírodních věd aj. V rovině věkové struktury jde o tradici školního uspořádání do ročníkového systému a v rovině kompetencí žáků jde zejména o tzv. přírodovědné činnosti. Dominantními činnostmi přírodovědné výuky jsou zde zejména [3]: pozorování a měření, srovnávání a uspořádávání, zkoumání a experimentování, předvídání a dokazování, diskuse a interpretace, modelování a matematizace, řešerše a komunikace.

*Příspěvek vznikl s podporou projektu GAČR 406/05/0188 „Konstruktivismus a jeho aplikace v integrovaném pojetí přírodovědného vzdělávání“.*

- [1] Bílek, Martin. Why to Learn Science and Technology? Selected Results of the International ROSE Project. In Mechlová, Erika (ed.): Information and Communication Technology in Education - Proceedings, Ostrava : University of Ostrava, 2005, s. 11 - 14.
- [2] Trna, Josef. Nastává éra mezioborových didaktik? Pedagogická orientace č. 1, 2005.
- [3] Duit, Reinhardt, Gropengiesser, Helmut, Stäudel, Lutz. Naturwissenschaftliches Arbeiten. Unterrichtsmaterial 5 - 10. Seelze-Velber : Erhard Friedrich Verlag GmbH, 2004.

#### 4Po-Po5

### ELECTROLYSIS - FROM COMPUTER ANIMATION TO REAL EXPERIMENT

Z. MELICHOVÁ, Š. BUDZÁK, I. NAGYOVÁ

*Univerzita Mateja Bela, Katedra chémie, Fakulta přírodních věd, Banská Bystrica*

Korešpondenční autor: [melichov@fpv.umb.sk](mailto:melichov@fpv.umb.sk)

The aim of this study was using computer animations for illustration of electrolysis processes on electrodes in combination with real experiment.

The changes connected with the electric charge transfer can be illustrated on the macroscopic level with chemical experiment, but on the microscopic level, which is too complicated for student's understanding, only with computer animations. The animation of electrolysis allows to observe moving of cations and anions in direct current electric field, transfer of electrons between ions and electrodes, to change voltage, current, time values of electrolysis. In the real experiment can be noticed only resulting products of electrolysis [1].

The animations were developed and designed in Macromedia Flash, which can be used for making quality animations and simple easy-using applications [2]. The

author of these computer animations is professor of chemistry Thomas J. Greenbowe (Iowa State University). We translated them to Slovak language and made some changes with his kind agreement.

The theory ground of electrolysis together with computer and real experiments will be available on the World Wide Web at [http://www.fpv.umb.sk/kat/kch/projekty/kega/3\\_4202\\_06.htm](http://www.fpv.umb.sk/kat/kch/projekty/kega/3_4202_06.htm)

This paper is a part of preparing material, that is created in project KEGA: *Electrochemical experiments and tasks in education*.

*This work was supported by grant KEGA No. 3/4202/06 from the Cultural and Educational Grant Agency of Ministry of Education of Slovak Republic.*

- [1] Nagyová I., Melichová Z., Kmet'ová J.: Laboratórna technika. 1. vyd. Banská Bystrica : UMB, 2001. 151 s. ISBN 80-8055-480-3.
- [2] Burke K. A., Greenbowe T. J., Windschitl M. A.: Developing and Using Conceptual Computer Animations for Chemistry Instruction. Journal of Chemical Education 75, 1658-1661 (1998).

#### 4Po-Po6

### CHEMIE - MÁM JI RÁD, NEMÁM JI RÁD

V. FADRNÁ<sup>1</sup>, R. MENZELOVÁ<sup>1</sup>, M. DOPITA<sup>2</sup>, H. GRECMANOVÁ<sup>3</sup>, L. KVÍTEK<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta

<sup>2</sup>Univerzita Palackého v Olomouci, Pedagogická fakulta, Katedra společenských věd

<sup>3</sup>Univerzita Palackého v Olomouci, Pedagogická fakulta, Katedra pedagogiky s celoškolskou působností

Korešpondenční autor: [veronika.fadrna@upol.cz](mailto:veronika.fadrna@upol.cz)

V červenci roku 2006 byl odstartován projekt pod názvem „Výzkum nových metod soutěží tvořivosti mládeže zaměřených na motivaci pro vědeckou výzkumnou činnost v oblasti přírodních věd, obzvláště v oborech matematických, fyzikálních a chemických“ (zkráceně STM-Morava) podporovaný Národním programem výzkumu II MŠMT ČR. V návaznosti na vznik tohoto projektu bylo realizováno výzkumné šetření mezi žáky základních a středních škol Olomouckého kraje. Provedené šetření bylo zaměřeno na zjištění aktuálního stavu zájmu mládeže o přírodovědné obory (především chemii, fyziku a matematiku) a o profesní kariéru ve výzkumu a vývoji. Vzhledem k tomu, že se tento projekt orientuje na vývoj a ověření nových soutěžních metod propagace přírodních věd mezi mládeží, bylo nutné ověření stavu výuky chemie, fyziky a matematiky a vztahu mládeže k těmto předmětům.

Výzkumu, který sledoval mimo jiné míru oblíbenosti

vyučovaných předmětů, se zúčastnilo 645 žáků základních škol a 500 žáků středních škol Olomouckého kraje. Zaměříme-li se na umístění přírodovědných předmětů u žáků základních škol, najdeme chemii na čtvrtém, matematiku na pátém a fyziku na devátém místě. Přírodopis se stal nejoblíbenějším předmětem. U žáků středních škol se na páté příčce umístila matematika, následována chemií na šesté a fyzikou na desáté příčce. Tělesná výchova byla u žáků středních škol vyhodnocena jako nejoblíbenější.

Závěrem musíme konstatovat, že přírodovědné předměty nebyly hodnoceny příliš příznivě. Chemie a fyzika jsou obecně oblíbenější u žáků základních škol než u žáků škol středních. Matematika do jisté míry obstála jak u žáků základních škol tak u středoškoláků; obsadila totiž u obou věkových kategorií stejnou, tedy pátou příčku.

*Autoři děkují za finanční podporu projektu MŠMT NPV II č. 2E06029.*

- [1] HAAS, Joachim. The Situation in Industry and the Loss of Interest in Science Education. *European Journal of Education*, 2005, roč. 40, č. 4, s. 405-416.
- [2] Klíčové údaje o vzdělávání v Evropě 2005 Vzdělávací systémy v Evropě ze všech úhlů pohledu. Brusel; Praha: Eurydice, Ústav pro informace ve vzdělávání, 2005.
- [3] Science Teaching at School in Europe. Policies and Research. Brussels: Eurydice, 2006, s. 55-62.

#### 4Po-Po7

### PŘÍRODOVĚDNÉ KROUŽKY NA STŘEDNÍCH ŠKOLÁCH OLOMOUCKÉHO KRAJE

P. TARKOWSKI<sup>1</sup>, P. CANKAŘ<sup>2</sup>, L. ZAJONCOVÁ<sup>1</sup>, L. KVÍTEK<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Palackého Olomouc, Přírodovědecká fakulta, Katedra biochemie

<sup>2</sup>Katedra organické chemie, PŘF UP v Olomouci, Tř. Svobody 8, 771 46 Olomouc

<sup>3</sup>Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta

Korešpondenční autor: petr.tarkowski@upol.cz

Jedním z efektivních způsobů popularizace přírodovědných oborů mezi středoškolskými studenty je vedení přírodovědných kroužků. V rámci projektu STM-Morava byly v září roku 2006 založeny přírodovědné kroužky na třinácti středních školách Olomouckého kraje. Společným tématem jejich práce byly „Rostliny, léčivé látky a drogy“. Téma bylo zvoleno tak, aby pokrývalo přírodovědné obory: chemie, fyzika a biologie. Studenti pracovali pod vedením svých středoškolských pedagogů. Jejich činnost byla metodicky a materiálově zajištěna Přírodovědeckou fakultou Univerzity Palackého. Kroužkům byly dodány návody k experimentální práci (chromatografie listových barviv, důkaz flavonoidů

v lipovém květu, izolace a důkaz terpenoidů z máty peprné). Studenti sami vypracovali literární přehled k danému tématu a rovněž realizovali námi připravené i vlastní experimenty. V průběhu měsíce února se většina kroužků zúčastnila laboratorních cvičení a exkurze na katedře biochemie a katedře botaniky PŘF UP. Studenti měli možnost seznámit se ze základy laboratorních technik (homogenizace biologického materiálu, extrakce, chromatografie, spektrofotometrie), provedli několik jednoduchých pokusů. Na jaře tohoto roku odevdali závěrečné práce, jejichž kvalita byla posuzována jak členy řešitelského týmu (dílčí úkol „Věda je zábava“), tak i externími oponenty. Dne 18. května proběhla na půdě Palackého Univerzity První studentská konference mladých přírodovědců<sup>1</sup>, jejíž součástí byly prezentace (přednášky a postery) práce jednotlivých kroužků. Nejlepší práce byly oceněny. Studenti aktivně se podílejí na práci přírodovědných kroužků, jejich spolužáci, učitelé i rodiče vyplnili anketu z níž získáváme informace o úspěšnosti této formy popularizace vědy. Výsledky získané z této ankety jsou předmětem tohoto sdělení.

*Projekt je realizován díky podpoře Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy (grant č. 2E06029) v rámci Národního programu výzkumu II.*

- [1] Petr Tarkowski, Martin Kubala, eds. První studentská konference mladých přírodovědců. Sborník příspěvků. Vydavatelství UP, Olomouc, 2007 (ISBN 978-80-244-1683-0).

#### 4Po-Po8

### PŘÍRODOVĚDNÉ EXPERIMENTY - INTEGRACE PŘÍRODOVĚDNÝCH POJMŮ VE VÝUCE CHEMIE, FYZIKY, BIOLOGIE

M. KLEČKOVÁ<sup>1</sup>, R. HOLUBOVÁ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Palackého Olomouc, Přírodovědecká fakulta, Katedra anorganické chemie

<sup>2</sup>Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta

Korešpondenční autor: marta.kleckova@upol.cz

V rámci pregraduální přípravy učitelů chemie, fyziky, biologie na Přírodovědecké fakultě UP stále přetrvává jednostranné zaměření výuky na jeden konkrétně studovaný obor. Velmi málo jsou využívány integrované přístupy při objasňování chemických či fyzikálních teorií při řešení modelových vědeckých problémů. I ve výuce oborových didaktik chemie, fyziky, biologie ne vždy jsou budoucí učitelé přírodovědných předmětů dostatečně vedeni k maximálnímu využití mezipředmětových vztahů a aplikaci výukových prvků integrované přírodovědy, přičemž v Rámcových vzdělávacích programech (RVP) pro všechny typy škol je integrace vzdělávacích obsahů napříč všemi předměty požadována, velký důraz

je kladen na mezipredmetové vzťahy medzi jednotlivými oborami tematickeho okruhu Človek a príroda.

Díličím riešením tohoto problému je zařazovať do výuky jak v pregraduálnej príprave učiteľov na VŠ, tak i následne ve školskej praxi na ZŠ a SŠ více reálnych experimentů, při nichž jsou zcela přirozeným způsobem využívány integrované přírodovědné poznatky. Především u žáků ZŠ ale také u studentů SŠ zajímavý experiment názorně a velmi účinně konkretizuje slovní vyjádření mnohých přírodovědných teorií, abstraktních pojmů, a tím umožní žákům resp. studentům konstruovat či rekonstruovat jejich představy o daném pojmu či problému. Úzké propojení teoretických poznatků a praktických chemických, fyzikálních, biologických - přírodovědných zkušeností získaných při vlastním experimentování usnadňuje žákům pochopit příčiny přírodních dějů. Vlastnoručně realizovaný experiment konkretizuje teoretické pojmy a verifikuje spojenie chemie, fyziky, biologie s jevy okolního sveta a s běžným životem.

Výběr přírodovědných experimentů pro výuku ZŠ a SŠ, pro integrované tematické celky - *Základní veličiny, Dělení směsí, Energie*, které lze využít jak v chemii, tak fyzice nebo biologii.

*Tato práce vznikla za podpory grantu FRVŠ 755/2007.*

- [1] Seager, S., L., Slabaugh, M., R.: Chemistry for today. Brooks/Cole, 2000.
- [2] Prokša, M.: Chémia a my. SPN, Bratislava 1997.
- [3] Šulcová R. a kol.: Náměty na pokusy z organické a praktické chemie. PČF UK, Praha 2006.

## Postery – sekcia 5

### 5Po-Po1

#### VSTUP ŤAŽKÝCH KOVŮ DO PŮDY APLIKÁCIU BOKALU

T. TÓTH<sup>1</sup>, P. LAZOR<sup>1</sup>, A. VOLLMANNOVÁ<sup>1</sup>, J. TOMÁŠ<sup>1</sup>, K. JOMOVÁ<sup>2</sup>, J. ČÉRY<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Katedra chémie, Fakulta biotechnológie a potravinárstva, SPU v Nitre, Tr. A. Hlinku 2, 949 01 Nitra

<sup>2</sup>Katedra chémie, Fakulta prírodných vied, Univerzita Konštantína Filozofa, Nitra

Korešpondenčný autor: tomas.toth@uniag.sk

Dobre vyhnutý kal (biokal) po výrobe bioplynu je nepáchnuci, dobre odvoditeľný a z hygienického hľadiska neškodný. Hnojenie poľnohospodárskych plodín vyhnutým biokalom je základným a v podstate najpoužívanejším spôsobom jeho využitia. Z hľadiska vplyvu na pôdu

má rozhodujúci vplyv kvalita biokalu (obsah sušiny), veľkosť použitej dávky a doba aplikácie. Aplikácia kalu však prináša aj environmentálne problémy - povrchový odtok, vylúhovanie dusičnanov do spodných vôd, prachanie amoniaku, možnú distribúciu patogénov a organických kontaminantov, vylúhovanie ťažkých kovov a ich odber rastlinami, ohrozenie zdravia patogénmi. Hodnotenie obsahu kadmia a olova v pôde po aplikácii biokalu sme realizovali na Výskumnej báze SPU - Kolíňani v rámci poloprevádzového pokusu, v dávke 50 ton kalu na hektár, aplikovaného na jeseň a jar. Aplikovaný biokal bol z hľadiska obsahu Cd a Pb vhodný pre aplikáciu do pôdy. Na základe rozborov pôdy možno konštatovať, že celkový obsah olova v kontrolnom variante bol v priemere 32,7 mg/kg. Aplikácia kalu mala za následok zníženie jeho obsahu v pôde na hodnotu 31,05 mg/kg (zníženie o 7 %). Priemerný obsah Cd v pôde bol v kontrolnom variante 1,195 mg/kg, vo variantoch po aplikácii kalu sa jeho obsah znížil o 8 % (1,12 mg/kg). Z hľadiska obsahu Cd a Pb sa ako výhodnejší spôsob aplikácie javí variant s hnojením na jeseň, keď dochádza k silnejšej väzbe ťažkých kovov na organickú hmotu v pôde. Zníženie obsahu Cd vo variante aplikácie kalu na jeseň bolo 10 %, kým zníženie obsahu po aplikácii na jar bolo 5,5 %. V prípade olova sa aplikáciou kalu na jar znížil jeho obsah o 6 %, aplikáciou na jeseň o 8,5 %.

*Príspevok vznikol podporou projektu VEGA č. 1/4414/07 a KEGA č. 3/4282/06*

- [1] HEGEDUSOVÁ, A. - HEGEDUS, O. - MUSILOVÁ, J. 2006. Riziká kontaminácie pôd kadmim. Vedecká monografia. Edícia Prírodovedec č. 222., UKF v Nitre. 89 s., ISBN 80-8094-047-9
- [2] BAJČAN, D. - LAHUČKÝ, L. - STANOVIČ, R. - TREBICHALSKÝ, P. - TIMORACKÁ, M. 2006. Rizikové látky v poľnohospodárskych plodinách Ipeľského regiónu. In: Výživa a potraviny pre tretie tisícročie „Výživa a nádorové ochorenia“. Nitra: SPU Nitra, 2006, pp. 18-21 ISBN 80-8069-775-2
- [3] TÓTH, T. - LAZOR, P. - MELICHÁČOVÁ, S. - ÁRVAY, J. - HARANGOZO, L. 2006. Riziká aplikácie kalov na pôdnu hygienu. In: Veda mladých 2006. MLZU: Brno. 2006. 9-14 s. ISBN 80-7157-974-2.

### 5Po-Po2

#### ÚČINOK ODTRIEDENEJ HOREČNATEJ HORNINY NA ZMENU PŮDNEJ REAKCIE

J. TOMÁŠ<sup>1</sup>, J. MUSILOVÁ<sup>1</sup>, A. VOLLMANNOVÁ<sup>1</sup>, K. JOMOVÁ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Katedra chémie, Fakulta biotechnológie a potravinárstva, SPU v Nitre, Tr. A. Hlinku 2, 949 01 Nitra

<sup>2</sup>Katedra chémie, Fakulta prírodných vied, Univerzita Konštantína Filozofa, Nitra

Korešpondenčný autor: *jan.tomas@uniag.sk*

Rozhodujúcim znakom horečnatých, horečnatovápenných a vápenatých hnojív popri zrnitosti je obsah účinnej zložky. Podľa STN 721227 je odseparovaný poloprodukt jemne mletej horniny vhodný na použitie ako horečnaté hnojivo na pôdy s nízkym obsahom horčička. Posudzovaný produkt obsahuje 84,64 % MgCO<sub>3</sub> a 8,30 % CaCO<sub>3</sub>, čo zodpovedá 40,46 % MgO a 4,65 % CaO. Hodnotený materiál môže byť zdrojom pomaly pôsobiaceho horčička a vápnika v pôdach. Sledovanie zmeny pH sme uskutočnili v laboratórnych podmienkach formou biologického, v definovaných podmienkach teploty, svetelnosti a vlhkosťnych pomerov. Pokus sme uskutočnili s jarným jačmeňom s použitím extrémne kyslej pôdy pH/KCl 4,12. Mletú horečnatú horninu (MMH) sme pridávali o dvoch rôznych zrnitostiach a to 0,05 - 0,5 mm a 0,05 - 2,0 mm. K sledovanému cieľu bolo zvolených 7 variantov ( 1. kontrola - bez hnojenia ; 2. hnojenie NPK; 3. NPK + MMH - 0,05 - 0,5 mm; 4. NPK + MMH - 0,05 - 2,0 mm; 5. NPK + MMH - 0,05 - 0,5 mm + (NH<sub>4</sub>)<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>; 6. NPK + MMH - 0,05 - 2,0 mm + (NH<sub>4</sub>)<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>; 7. NPK + kieserit. Celková dĺžka biologického testu bola 40 dní a po jeho skončení sme analyzovali získanú nadzemnú hmotu a stanovili sme zmenu pH /H<sub>2</sub>O a pH/KCl ako aj obsahy pôdneho Ca a Mg podľa Mehlicha II. Zo výsledkov vyplýva, že na extrémne kyslej pôde po aplikácii MHH sa hodnoty pH zvyšovali. Je to spôsobené tým, že na extrémne kyslej pôde sú o niečo rozpustnejšie zložky MHH, predovšetkým jej určujúca chemická zložka uhličitanu horečnatého ako i ďalšia prítomná zložka uhličitanu vápenatého. Neutralizačný účinok závisí od rozpúšťania MHH, ktoré sa uskutočňuje fyzikálnou a chemickou cestou. Fyzikálny spôsob rozpúšťania je u hodnotených uhličitanových hnojív prakticky zanedbateľný. Určujúcou rozpustnosťou je chemická rozpustnosť, ktorú v pôde akceleruje rozpustený oxid uhličitý v pôdnom roztoku za vzniku rozpustných solí horčička a vápnika.

*Príspevok vznikol podporou VEGA projektu č. 1/2428/05*

- [1] BAJČAN, D. - LAHUČKÝ, L. - STANOVIČ, R. - TREBICHALSKÝ, P. - TIMORACKÁ, M. 2006. Rizikové látky v poľnohospodárskych plodinách Ipeľského regiónu. In: Výživa a potraviny pre tretie tisícročie „ Výživa a nádorové ochorenia“. Nitra: SPU Nitra, 2006, pp. 18-21 ISBN 80-8069-775-2
- [2] TOMÁŠ, J. - TÓTH, T. - LAZOR, P. 2006. Využitie mletej odseparovanej magnezitovej horniny ako horečnatého hnojiva. In: Chemické listy : časopis pro průmysl chemický. - ISSN 0009-2770. - Roč. 100, č. 8 (2006), s. 717-718.

### 5Po-Po3

#### ÚČINOK KADMIA NA NIEKTORÉ UKAZOVATELE VÝŽIVOVEJ HODNOTY V HL'UZÁK LUL'KA ZEMIAKOVÉHO

J. MUSILOVÁ, J. BYSTRICKÁ, A. VOLLMANNOVÁ, J. TOMÁŠ, A. HRUŠKOVIČOVÁ

*Katedra chémie, Fakulta biotechnológie a potravinárstva, SPU v Nitre, Tr. A. Hlinku 2, 949 01 Nitra*

Korešpondenčný autor: *janette.musilova@uniag.sk*

Jedným z rizikových kovov negatívne ovplyvňujúcich životné prostredie v posledných desaťročiach je kadmium. Jeho vstup do potravinového reťazca cez pôdu a poľnohospodárske plodiny predstavuje závažné riziko pre ľudské zdravie.

V práci sme sledovali kumuláciu kadmia v hl'uzách zemiakov rôznych odrôd (Jubilant, Agria, Livera, Asterix), pestovaných na pôdach zaťažených rôznymi obsahmi Cd (0; 3; 5; 10 mg.kg<sup>-1</sup> pôdy).

Ako najväčší akumulátor Cd prejavila odroda Jubilent (1: 0,5887; 2: 2,3271; 3: 2,8983; 4: 3,4642 mg.kg<sup>-1</sup> suš.). Avšak v porovnaní obsahu Cd vo 4. variante s 1. variantom bolo najvyššie zvýšenie u odrody Livera (6,5x viac), nasleduje odroda Agria (5,96x viac) a najmenšie u odrody Asterix (5,88x viac - obr. 1).

Z porovnania obsahu vodorozpustných cukrov v jednotlivých variantoch vyplýva, že pri nižších aplikovaných dávkach Cd najnižšie obsahy cukrov obsahujú odrody Agria a Asterix a najvyššie obsahy odroda Junior. Ďalším zvyšovaním obsahu Cd klesá obsah cukrov u odrody Junior a zvyšuje sa u odrody Asterix a Livera (tabuľka).

Obsah Cd v cukornej frakcii zemiakov bol u všetkých odrôd najvyšší v 3. variante (obr. 2). Najväčšie zvýšenie obsahu Cd v porovnaní s kontrolným variantom bolo u odrody Asterix (7,4 x > kontrola) a najmenšie u odrody Livera (3,37 x > kontrola).

Nezistili sme priamu súvislosť medzi obsahom cukru v rôznych odrodách a obsahom Cd v hl'uzách zemiakov, avšak prejavila sa závislosť kumulácie Cd v cukornej frakcii od miery kontaminácie pôdy kadmium. Vzhľadom k tomu, že ide o prvotné výsledky, ktoré je potrebné doplniť ďalšími analýzami, nie je zatiaľ možné vyvodzovať jednoznačné závery.

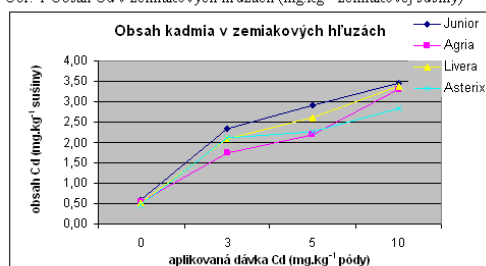
*VEGA 1/4428/07*

- [1] BAJČAN, D. - TOMÁŠ, J. - TÓTH, T. - LAHUČKÝ, L. - MELICHÁČOVÁ, S. 2005. Rizikové faktory poľnohospodárskej výroby Hontianskeho regiónu. In: Risk factors of food chain - Proceeding book of 5th international scientific conference. Nitra: SPU Nitra, 2005, s. 6-7. ISBN 80-8069-593-8.
- [2] BAJČAN, D. - LAHUČKÝ, L. - STANOVIČ, R. - TREBICHALSKÝ, P. - TIMORACKÁ, M. 2006.

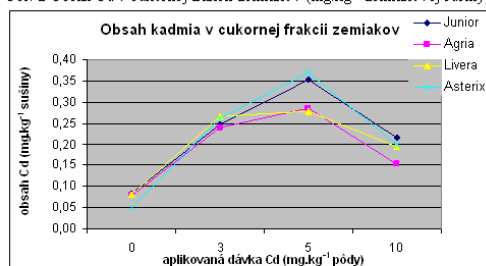
Rizikové látky v poľnohospodárskych plodinách Ipeľského regiónu. In: Výživa a potraviny pre tretie tisícročie „Výživa a nádorové ochorenia“. Nitra: SPU Nitra, 2006, pp. 18-21. ISBN 80-8069-775-2.

- [3] ÁRVAY, J. - STANOVIČ, R. - HARANGOZO, L. 2006. Riziká metallickej kontaminácie v alúviu Štiavnického potoka. In: Veda mladých 2006. (Zb. abstraktov zo 4. vedeckej konferencie s medzinárodnou účasťou). Nitra: SPU, 2006. S. 55. ISBN 80-8069-742-6.

Obr. 1 Obsah Cd v zemiakových hľuzách ( $\text{mg kg}^{-1}$  zemiakovej sušiny)



Obr. 2 Obsah Cd v cukrovej frakcii zemiakov ( $\text{mg kg}^{-1}$  zemiakovej sušiny)



Tabuľka: Množstvo cukru (%) v zemiakových hľuzách

Variant	Množstvo cukru (%)			
	1	2	3	4
Junior	0,6875	2,41	0,712	0,305
Agria	0,175	0,21	0,637	0,5533
Livera	0,175	0,475	0,3	1,3
Asterix	0,2375	0,9385	1,85	2,5375

## 5Po-Po4

### VSTUP KADMIA DO SÓJE VO VZŤAHU K PRÍJMU ZINKU

J. BYSTRICKÁ, J. MUSILOVÁ, A. VOLLMANNOVÁ

Katedra chémie, Fakulta biotechnológie a potravinárstva, SPU v Nitre, Tr. A. Hlinku 2, 949 01 Nitra

Korešpondenčný autor: judita.bystricka@uniag.sk

Ťažké kovy ako jedna zo skupín kontaminantov, majú veľký ekologický vplyv podmienený ich ekotoxicitou, nedegradovateľnosťou a schopnosťou akumulácie (Tóth, 2006). Zo všetkých prvkov, ktoré sa dostávajú do potravinového reťazca a spôsobujú kontamináciu potravín, sa za najtoxickejšie považujú arzén, kadmium, ortuť a olovo (Stanovič, 2006).

Vzhľadom k istej príbuznosti kadmia a zinku v práci sme sledovali samostatný účinok kadmia na rast, úrodu a kumuláciu schopnosť sóje (*Glycine max*) a zhodnotili sme

vplyv, ak sa k izolovanému účinku kademnatých kationtov pripojí účinok dvojmocných kationtov zinku.

Zo získaných výsledkov môžeme konštatovať, že prídavok kadmia do pôdy v množstve 10 mg na kg pôdy mal negatívny vplyv tak na výšku úrody semien sóje ako aj na obsah kadmia v sušine sóje. Kým v kontrolnom variante (A-kontrola) priemerná úroda sóje predstavovala 20,2 g sója/nádoba, vo variante B (10 mg Cd/kg pôdy) úroda semien sóje voči kontrole sa znížila o 32,43 %. Vo variante C (10 mg Cd/kg pôdy + 80 mg Zn/kg pôdy), kde sme na elimináciu škodlivého účinku kadmia zapravili aj zinok do pôdy, nastalo opäť zníženie úrody semien sóje voči kontrole o 9,16 %, ale v porovnaní s variantom B nastalo zvýšenie o 34,43 % čo môžeme pozitívne hodnotiť.

Z našich výsledkov vyplýva, že prídavok Zn do živného prostredia znižuje príjem kadmia rastlinami. Zatiaľ čo vo variante B priemerný obsah kadmia v semenách sóje predstavovala hodnotu 3,40 mg/kg sušiny, vo variante C táto hodnota predstavovala 0,18 mg/kg sušiny, čo sa pohybovalo na úrovni kontroly. Prezentované výsledky naznačujú že zinok môže potláčať príjem kadmia rastlinami, a tým obmedziť vstup tohto prvku do potravinového reťazca.

vega...

- [1] STANOVIČ, R. - MELICHÁČOVÁ, S. - TREBICHALSKÝ, P. 2006. Kumulácia vybraných ťažkých kovov laskavcom. In: Zem v pasci? Analýza zložiek životného prostredia. (Zborník z I. vedeckej konferencie s medzinárodnou účasťou, CD). Zvolen : TU 2006. ISBN 80-228-1553-5

- [2] TÓTH, T. - TOMÁŠ, J. - LAZOR, P. - CHLPÍK, J. - JOMOVÁ, K. - HEGEDŮSOVÁ, A. 2005. Rizikové prvky v pôdach a plodinách Štiavnického regiónu. In: Chem. Zb. 57. zjazdu Chem. spoločností. Tatranské Matliare, 2005, s. 285

## 5Po-Po5

### RIZIKO VSTUPU ZINKU, KADMIA, MEDI A OLOVA DO POTRAVINOVÉHO REŤAZCA V REGIÓNE S METALICKOU ZÁŤAŽOU PÔDY

A. VOLLMANNOVÁ<sup>1</sup>, J. BYSTRICKÁ<sup>1</sup>, L. LAHUČKÝ<sup>1</sup>, T. TÓTH<sup>1</sup>, K. JOMOVÁ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Katedra chémie, Fakulta biotechnológie a potravinárstva, SPU v Nitre, Tr. A. Hlinku 2, 949 01 Nitra

<sup>2</sup>Katedra chémie, Fakulta prírodných vied, Univerzita Konštantína Filozofa, Nitra

Korešpondenčný autor: alena.vollmannova@uniag.sk

Z celkovej výmery SR predstavoval v roku 2005 podiel poľnohospodárskej pôdy 49,62 %. V porovnaní s predchádzajúcim rokom prišlo v SR k zväčšeniu rozlohy



mozaiky polí, lúk a trvalých kultúr o 165,5 km<sup>2</sup> na úkor najmä ornej pôdy. Nastal úbytok ornej pôdy o 56,9 km<sup>2</sup> najmä v prospech lúk. Trvalé trávne porasty môžu byť teda významným miestom vstupu tak esenciálnych makro- a mikroprvkov, ako aj kontaminantov do potravového reťazca (pôda - rastlina - živočích - človek).

V príspevku hodnotíme hygienickú kvalitu rezačky laločnatej dopestovanej na metalicky kontaminovanej pôde z alúvia Štiavnického potoka z pohľadu obsahu Zn, Cd, Cu a Pb. Cieľom realizovaného vegetačného nádobového pokusu bolo minimalizovať vstup rizikových kovov do rastlinnej produkcie. Pre tento účel boli do pôdy v rôznych dávkach a kombináciách aplikované sorbenty upravujúce tak pôdnu reakciu, ako aj pôdny obsah organickej hmoty (vápenec, kaustik, mletá magnezitová hornina, Humix). Rastliny sa zberali 4-krát, pričom rozdiely v kumulácii jednotlivých kovov nadzemnou fytoomasou boli zaznamenané nielen vo variantoch, ale aj v zberoch. Najúčinnjším opatrením znižujúcim príjem kovov rastlinou bola aplikácia kombinácie kaustiku, Humixu a mletej magnezitovej horniny do pôdy (pokles príjmu Zn o 32-59 %, Cd o 26-51 %, Cu o 8-22 % a Pb o 59-72 %). V ojedinelých prípadoch sa prejavili niektoré zásahy negatívne zvýšením obsahov kovov v porovnaní s kontrolným variantom (Cd a Cu pri aplikácii Humixu). Najviac Pb sa kumulovalo plodinou pri I. zbere, najväčšie množstvo ostatných kovov pri II. zbere a najmenšie množstvo všetkých sledovaných rizikových kovov bolo stanovené v nadzemnej fytomas v rastlinách IV. zberu.

Z hľadiska hygienickej kvality predstavuje riziko iba Cd, ktorého obsah je dokonca aj vo variante s najnižšou stanoveným množstvom o 150% vyšší ako hygienický limit určený pre krmivá. Hygienické limity pre obsah Zn a Cu nie sú súčasným legislatívnym predpisom dané, avšak z pohľadu predchádzajúcej legislatívy sa javí rizikovým aj Zn.

VEGA 1/3455/06, KEGA 3/5081/07

- [1] MUSILOVÁ, J. - TREBICHALSKÝ, P. - BAJČAN, D. 2006. Pôdne obsahy ťažkých kovov v regiónoch Podunajskej nížiny s lokálnym znečistením. In : Vedecká konferencia s medzinárodnou účasťou, Environmentálne inžinierstvo, Košice 12. - 13. septembar 2006. ISBN 80-8073-607-3
- [2] ÁRVAY, J. - STANOVIČ, R. 2006. Metalická kontaminácia pôd v oblasti Štiavnických vrchov. In: Rizikové faktory potravového reťazca, VI. Vedecká konferencia s medzinárodnou účasťou. Nitra: SPU, 2006. s. 38-41. ISBN 80-8069-760-4
- [3] TOMÁŠ, J. - BAJČAN, D. - LAZOR, P. - PARILÁKOVÁ, K. - NOSKOVIČ, J. - KOVÁČIK, P. 2005. Overenie vhodnosti aplikácie mletej magnezitovej horniny získanej pri výrobe magnezitu. In

: Zborník z 57. zjazdu chemických spoločností. Tatranské Matliare, sept. 2005. ChemZi, Vol. 1/1, s. 285, ISSN 1336-7242

## 5Po-Po6

### ČO OVPLYVŇUJE KVALITU OVZDUŠIA V MESTE NITRA?

J. DUBAJOVÁ<sup>1</sup>, Z. KLÓŠLOVÁ<sup>2</sup>, Z. VASSANYI<sup>2</sup>, O. HEGEDUS<sup>3</sup>

<sup>1</sup>FPV UKF v Nitre, RÚVZ so sídlom v Nitre

<sup>2</sup>Regionálny úrad verejného zdravotníctva so sídlom v Banskej Bystrici

<sup>3</sup>Univerzita Konštantína Filozofa, Fakulta prírodných vied, Katedra chémie, Tr. A. Hlinku, 1, 949 74 Nitra

Korešpondenčný autor: ocha@ruvznr.sk

V predloženej práci sa sledovali významné polutanty znečisťujúce vonkajšie ovzdušie mesta Nitry. Sú to:

- polietavý prach,
- polyaromatické uhl'ovodíky (PAU),
- benzén,
- ozón a oxidy N<sub>2</sub> spolu s organickými látkami.

Významnú skupinu monitorovaných látok predstavujú perzistentné organické polutanty (POPs), medzi ktoré patria aj PAU [1]. Stanovenie koncentrácie 1-hydroxypyrenu ako metabolitu pyrenu v moči pracovníkov je vhodným biomarkerom profesionálnej expozície PAU [2].

Sledovalo sa vonkajšie i pracovné ovzdušie, pričom pre hodnotenie pracovného prostredia sa vybrala výroba asfaltovej zmesi a závod na výrobu gumárenských výrobkov.

Odber a stanovenie PAU v ovzduší boli realizované podľa metód NIOSH 5506 [3]. Hladina 1-hydroxypyrenu v moči bola metódou HPLC s fluorimetrickou detekciou.

Pri výrobe asfaltovej zmesi a pri kladení asfaltových kobercov v dýchacej zóne pracovníkov sa koncentrácie sumy PAU pohybovali v intervale 0,2 - 5,6 µg/m<sup>3</sup>, hodnoty 1-hydroxypyrenu v moči pracovníkov boli stanovené v rozsahu 0,5 - 1,5 µg/g kreatinínu. V závode na výrobu gumárenských výrobkov hodnoty koncentrácie sumy PAU sa pohybovali u pracovníkov vykonávajúcich lisovanie výrobkov za tepla v intervale 3,6 - 47,6 µg/m<sup>3</sup> a u 4 pracovníkov v prípravovni gumárenských predlískov v rozsahu 0,6 - 2,1 µg/m<sup>3</sup>. Hodnoty 1-hydroxypyrenu v moči týchto pracovníkov boli stanovené v rozsahu 0,4 - 4,1 µg/g kreatinínu.

V životnom prostredí sa odobralo 18 vzoriek vonkajšieho ovzdušia na štyroch odberových lokalitách mesta Nitry. Výsledky sa pohybovali od 0,035 do 0,480 µg/m<sup>3</sup>.

V analyzovaných vzorkách moča 20 neexponovaných pracovníkov hodnoty 1-hydroxypyrenu boli stanovené v rozsahu 0,06 - 3,7 µg/g kreatinínu.



- [1] Prousek J.: Bratislava: Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU, 2005, 247 s. ISBN 80-227-2199-9.
- [2] VanRooij J.G.M., Bodelier-Bade M.M., Jongeneelen F.J.: Br. J. Ind. Med. 50, 623-632 (1993).
- [3] NIOSH 5506: Polynuclear Aromatic Hydrocarbons (1985).

**5Po-Po7****VYLUHOVATELNOST TĚŽKÝCH KOVŮ Z VZORKŮ VRB POUŽITÝCH PRO FYTOREMEDIACI**

M. ŠYC<sup>1</sup>, M. POHOŘELÝ<sup>1</sup>, M. HOMOLOVÁ<sup>2</sup>, M. PUNČOCHÁŘ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ÚCHP AV ČR, v.v.i.

<sup>2</sup>ČZU Praha

Korešpondenčný autor: *syc@icpf.cas.cz*

Jako jeden z progresivních způsobů sanace starých ekologických zátěží je uvažována fytoremediace, tj. využití rostlin k fixaci, akumulaci a rozkladu nebezpečných kontaminantů. Největším přínosem fytoremediace jakožto sanační metody, na rozdíl od některých jiných metod (spalování, BCD), je šetrnost k životnímu prostředí. Vzorky vrby pocházejí ze sanované oblasti pod obcí Trhové Dušníky (v blízkosti řeky Litavky na Příbramsku v ČR), která byla v minulosti silně znečištěna při zpracování olovených rud a těžbě galenitu.

V práci byla sledována vyluhovatelnost jednotlivých těžkých kovů (Cd, Pb, Cu). Cílem výluhů bylo zjistit potenciální množství těžkých kovů, které se při skládování kontaminované biomasy mohou vyloučit zpět do životního prostředí. Pro zjištění byly použity roztoky simulující přírodní podmínky v místě úložiště (mikroorganismy, dešť aj.).

Nejvyšší vyluhovatelnost vykazuje Cd v prostředí kyseliny mravenčí a octové, tuto skutečnost lze zřejmě připisat tvorbě rozpustných komplexů kovu s karboxylovými kyselinami.

*Tato práce vznikla díky finanční podpoře Grantové agentury České republiky, projekt číslo 104/07/0977.*

- [1] Fischerová Z, Tlustoš P, Száková J, Šichorová K: A comparison of phytoremediation capability of selected plant species for given trace elements, Environmental Pollution, 144:93, 2006
- [2] Sas-Nowosielska A, Kucharski R, Malkowski E, Pogrzeba M, Kuperberg JM, Krynski K: Phytoextraction crop disposal - an unsolved problem, Environmental Pollution, 128:373, 2004

**5Po-Po8****DISTRIBUCE TĚŽKÝCH KOVŮ PŘI FLUIDNÍM SPALOVÁNÍ VRB POUŽITÝCH PRO FYTOREMEDIACI KONTAMINOVANÝCH PŮD**

M. POHOŘELÝ<sup>1</sup>, M. ŠYC<sup>1</sup>, J. HABART<sup>2</sup>, P. TLUSTOŠ<sup>2</sup>, K. SVOBODA<sup>1</sup>, M. PUNČOCHÁŘ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ÚCHP AV ČR, v.v.i.

<sup>2</sup>ČZU Praha

Korešpondenčný autor: *pohorely@icpf.cas.cz*

Omezené zásoby fosilních paliv, jakožto nejvýznamnějšího zdroje energie, vedou v současnosti k hledání alternativ, mezi něž bezesporu patří i obnovitelné zdroje energie. Významná úloha je přisuzována biomase, jejíž potenciál je v České republice pravděpodobně nejlépe využitelný. Postupné zavádění nových energetických plodin, či zvýšení podílu plodin pro oleochemii, povede k opětovnému využití veškerých dostupných zemědělských pozemků. Ekonomicky a ekologicky výhodnou variantou se proto postupně stává pěstování energetických dřevin i na kontaminovaných půdách.

Jako experimentální dřeviny byly vybrány vrba křehká (*Salix fragilis*) a vrba jíva (*Salix caprea*), které mají schopnost akumulace anorganických i organických polutantů a tím i detoxifikace zamořených půd.

Cílem této práce bylo vyšetřit chemické složení použitých vrb s ohledem na vlastnosti významné pro spalování, jakož i zjistit základní fyzikální vlastnosti. Hlavním cílem práce bylo provést prvotní spalovací experimenty na fluidním generátoru s hustou fluidní vrstvou, sledovat distribuci těžkých kovů mezi fluidní vrstvou a horkým cyklónem a optimalizovat podmínky spalování.

*Tato práce vznikla díky finanční podpoře Grantové agentury České republiky, projekt číslo 104/07/0977 a Grantové agentuře Akademie věd ČR, projekt A400720701.*

- [1] Sas-Nowosielska A, Kucharski R, Malkowski E, Pogrzeba M, Kuperberg JM, Krynski K: Phytoextraction crop disposal - an unsolved problem, Environmental Pollution, 128:373, 2004
- [2] Hartman M, Svoboda K, Pohořelý M, Trnka O: Combustion of Dried Sewage Sludge in a Fluidized-Bed Reactor, Ind. Eng. Chem. Res., 44:3432-3441, 2005

**5Po-Po9****VPLYV VYBRANÉHO PREBIOTIKA NA SENZORICKÉ VLASTNOSTI MLIEČNE FERMENTOVANÝCH KAPUSTOVÝCH ŠTIAV**

I. ŠIMONOVÁ<sup>1</sup>, J. KAROVIČOVÁ<sup>1</sup>, M. GREIFOVÁ<sup>2</sup>, K. ORAVCOVÁ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Slovenská technická univerzita, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav biotechnológie a potravinárstva, Oddelenie potravinárskej technológie

<sup>2</sup>Slovenská technická univerzita, Fakulta Chemickej a Potravinárskej technológie, Radlinského 9, Bratislava, 812 37

Korešpondenčný autor: *ivana.simonova@stuba.sk*

Cieľom senzorickeho hodnotenia mliečne fermentovaných kapustových štiav bolo určiť senzorycky prijateľnejší výrobok pre spotrebiteľa. Na prípravu fermentovaných zeleninových štiav bola použitá biela hlávková kapusta zakúpená v maloobchodnej sieti. Surová kapustová šťava bola fortifikovaná 2 % D-glukózy a 0,5 % NaCl. Fermentácia prebiehala spontánne, s použitím baktérie mliečného kvasenia *Lactobacillus plantarum* CCM 7039 (Česká zbírka mikroorganizmů, Brno) a s prídavkom 2 % inulínu (Raftiline GR, Orafi, Belgicko). Fermentácia trvala 168 hodín pri teplote  $20 \pm 3$  °C (1).

Súbor hodnotiteľov pozostával z 10 osôb, ktorí boli preskúšaní na základné testy. Smerodajným ukazovateľom pri vyhodnení bola celková chuťnosť, ktorá predstavuje optimálne zladenie všetkých deskriptorov chute a vône. Na základe senzorickeho hodnotenia bolo zistené, že kapustová šťava fermentovaná spontánne a kapustová šťava s 2 % prídavkom inulínu fermentovaná s *Lactobacillus plantarum* CCM 7039 vykazovali najvyššiu celkovú chuťnosť (85,20 % a 80,30 %) v 96 hodine fermentácie. Kapustová šťava fermentovaná s *Lactobacillus plantarum* CCM 7039 dosahovala optimálnu celkovú chuťnosť (89,20 %) v 72 hodine fermentácie.

Prebiotiká sú definované ako nestráviteľné potravinové zložky, ktoré priaznivo pôsobia na hostiteľa selektívnym stimulovaním rastu a/alebo aktivity jedného alebo limitovaného počtu baktérií hrubého čreva a tým pozitívne ovplyvňujú zdravie konzumenta (2). Takýto mechanizmus účinku majú aj v súčasnosti najznámejšie prebiotiká - inulín a oligofruktóza. Inulín je prirodzene sa vyskytujúci sacharid s prospešnými nutričnými a technologickými vlastnosťami. V krajinách EÚ je inulín zaradený medzi potravinové zložky. Môže sa používať bez obmedzenia ako prídavná látka v potravinách a nápojoch (3).

Práca vznikla za podpory grantov VEGA 1/3546/06 a APVV 031006

- [1] KOHAJDOVÁ, Z., KAROVIČOVÁ, J.: Czech J. Food Sci., 22, 39-50 (2004)
- [2] TOMASIK, J.T., TOMASIK, P.: Cereal Chem. 80, 113 - 117 (2003)
- [3] LUKÁČOVÁ, D., KAROVIČOVÁ, J.: Bull. PV, 42, 27 - 41 (2003)

## 5Po-Po10

### ÚČINNOSŤ KOMPLEXOV KOVOV S HETEROCYKlickým N-DONOROVÝM LIGANDOM - NIKOTÍNAMIDOM (NIA) NA SLADKOVODNÉ RIASY

A. FARGAŠOVÁ<sup>1</sup>, I. ONDREJKOVIČOVÁ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra ekokošológie a fyziotaktiky

<sup>2</sup>Oddelenie anorganickej chémie, Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov, FCHPT STU, Bratislava

Korešpondenčný autor: *fargasova@fns.uniba.sk*

Mnohé kovy majú tendenciu vchádzať vo vodnom prostredí a po vstupe do živých organizmov do interakcií s biologicky aktívnymi látkami, akými sú aj heterocyklické zlúčeniny dusíka. Pri interakciách často dochádza ku chelatacii alebo komplexácii kovov, čím sa mení veľkosť molekuly, biologická účinnosť a penetrácia do buniek (1). Práca hodnotila ako väzba na biologicky aktívny N-donorový ligand nikotínamid ovplyvňuje rast a produkciu chlorofylu a a b v riasach *Scenedesmus quadricauda* a *Chlorella vulgaris*. Účinky komplexov  $H_2SeO_4(nia)_3$ ,  $Cd(NCS)_2(nia)_2$ ,  $Cd(NCSe)_2(nia)_2$ ,  $Zn(NCS)_2(nia)_2$  a  $NiCl_2(nia)_2$  sa porovnávali s účinkami anorganických zlúčenín kovov  $Na_2SeO_4$ ,  $CdCl_2 \cdot 2.5H_2O$ ,  $ZnSO_4 \cdot 7H_2O$  a  $NiCl_2 \cdot 6H_2O$ . Všetky sledované parametre najviac inhibovali zlúčeniny Cd a najmenej Se(VI). Zlúčeniny Ni boli toxickejšie ako zlúčeniny Zn. Na základe EC50 hodnôt (Tab. 1.) sa dajú zostaviť nasledovné inhibičné rady: S. quadricauda rast:  $CdCl_2 > NiCl_2 > Cd(NCS)_2(nia)_2 > NiCl_2(nia)_2 > ZnSO_4 > Cd(NCSe)_2(nia)_2 > Zn(CNS)_2(nia)_2 > H_2SeO_4(nia)_3 > Na_2SeO_4$  Chla, Chb:  $CdCl_2 > Cd(NCS)_2(nia)_2 > NiCl_2 > Cd(NCSe)_2(nia)_2 > NiCl_2(nia)_2 > ZnSO_4 > Zn(CNS)_2(nia)_2 > Na_2SeO_4 > H_2SeO_4(nia)_3$  C. vulgaris rast:  $CdCl_2 > NiCl_2 > Cd(NCS)_2(nia)_2 > Cd(NCSe)_2(nia)_2 > ZnSO_4 > NiCl_2(nia)_2 > Zn(CNS)_2(nia)_2 > Na_2SeO_4 > H_2SeO_4(nia)_3$  Chla:  $CdCl_2 > Cd(NCS)_2(nia)_2 > NiCl_2 > Na_2SeO_4 > ZnSO_4 = Cd(NCSe)_2(nia)_2 > NiCl_2(nia)_2 > H_2SeO_4(nia)_3 > Zn(CNS)_2(nia)_2$  Chb:  $CdCl_2 > NiCl_2 > Cd(NCS)_2(nia)_2 > NiCl_2(nia)_2 > Cd(NCSe)_2(nia)_2 > ZnSO_4 > Na_2SeO_4 > H_2SeO_4(nia)_3 = Zn(CNS)_2(nia)_2$

Testy potvrdili vysokú toxicitu zlúčenín Cd a relatívne nízku toxicitu zlúčenín Se, ktoré sa v prírodných vodách vyskytujú len v stopových množstvách vo forme Se(IV) a Se(VI). Riasy uprednostňujú Se(VI), čo vysvetľuje nízku toxicitu testovaných zlúčenín Se (2). Viazanie kovov do komplexov s nia ich toxicitu výrazne znižovalo. Nahradením NCS- anionickej skupiny v Cd(II) komplexe skupinou NCSe-, ktorá obsahovala aj Se, sa inhibičný účinok Cd znižoval pri raste o 1/3 a pri fotosyntetických pigmentoch takmer o polovicu. Výsledky potvrdili, že toxicita testovaných kovov je ovplyvňovaná nielen aktívnymi absorpčnými centrami, ktoré sa nachádzajú na povrchu bunkovej steny rias, ale aj priestorovou štruk-

túrou komplexu a veľkosťou jeho molekuly (1,2).

Práca bola podporovaná VEGA grantom 1/4361/07.

- [1] 1. Fargašová, A., Ondrejkočová, I., Melník, M. In: Melník, M., Šíma, J., Tatarko, M. (Eds.) *Advances in Coordination, Bioinorganic and Inorganic Chemistry*. Slovak Technical University Press, Bratislava, 2005, p. 42-51
- [2] 2. Fargašová, A., Svetková, K. In: Ambrožová, J. (Ed.) *19th Seminar of Topical Issues of Water Supply Biology*. Prague, Czech Republic, 2003, p. 216-220

Látka	EC <sub>50</sub> (95 % CI) (mg/l)					
	<i>Scenedesmus quadricauda</i>			<i>Chlorella vulgaris</i>		
	IR	Chla	Chlb	IR	Chla	Chlb
Ni <sub>2</sub> SeO <sub>4</sub>	115,5 (110,2-122,8)	91,4 (94,1-97,2)	108,7 (100,2-112,6)	125,1 (116,5-129,8)	86,3 (82,7-93,8)	104,8 (98,8-107,2)
H <sub>2</sub> SeO <sub>4</sub> (naH)	110,2 (101,4-120,5)	96,6 (90,7-102,8)	114,5 (106,7-117,9)	129,9 (117,6-135,7)	89,5 (91,0-108,2)	118,8 (111,6-123,8)
CoCl <sub>2</sub> ·2SH <sub>2</sub> O	54,4 (50,2-58,7)	32,6 (28,7-36,1)	43,2 (38,5-46,1)	64,4 (58,7-67,2)	31,7 (27,3-33,8)	50,9 (45,2-54,7)
Ca(NCS) <sub>2</sub> (naH)	63,7 (56,9-65,8)	35,8 (30,8-38,9)	47,1 (41,7-52,3)	83,5 (77,8-88,4)	57,0 (52,7-61,8)	75,6 (69,5-79,1)
Ca(NCS) <sub>2</sub> (naH) <sub>2</sub>	88,7 (75,7-94,2)	50,7 (44,5-57,0)	63,2 (56,8-66,7)	108,7 (100,2-113,6)	87,3 (81,2-93,6)	95,7 (89,2-100,5)
ZnSO <sub>4</sub> ·7H <sub>2</sub> O	71,2 (64,8-79,3)	68,2 (61,6-73,8)	97,8 (83,1-92,8)	112,8 (106,4-118,9)	87,0 (80,7-89,7)	96,5 (90,7-102,3)
Zn(NCS) <sub>2</sub> (naH) <sub>2</sub>	98,4 (84,6-103,6)	78,5 (70,7-81,2)	96,5 (94,2-102,3)	121,3 (116,3-129,1)	113,7 (107,8-116,2)	119,2 (108,9-124,0)
NiCl <sub>2</sub> ·6H <sub>2</sub> O	58,1 (43,8-64,2)	42,0 (37,6-47,0)	52,1 (47,7-56,8)	82,4 (77,4-89,1)	59,8 (51,7-64,3)	67,4 (61,2-72,6)
NiCl <sub>2</sub> (naH) <sub>2</sub>	67,3 (61,6-73,8)	56,4 (52,1-60,8)	73,5 (67,2-76,8)	118,5 (104,5-124,1)	96,3 (92,1-104,6)	85,5 (79,1-89,9)

CI – interval spoľahlivosti; IR – inhibícia rýchlosti rastu; Chla – chlorofyl a; Chlb – chlorofyl b

Tab. 1. Inhibícia rýchlosti rastu (IR) a produkcie chlorofylov (Chla, Chlb) v riasach *Scenedesmus quadricauda* a *Chlorella vulgaris* vyjadrená ako EC<sub>50</sub> hodnoty a ich 95 % intervaly spoľahlivosti (CI)

### 5Po-Po11

#### ENVIRONMENTÁLNE ÚČINKY STAREJ BANSKEJ ČINNOSTI V ŠTIAVNICKÝCH VRCHOCH NA POĽNOHOSPODÁRSTVO IPEĽSKÉHO REGIÓNU

D. BAJČAN, J. TOMÁŠ, T. TÓTH, L. HARANGOZÓ, J. ČÉRY

Katedra chémie, Fakulta biotechnológie a potravinárstva, SPU v Nitre, Tr. A. Hlinku 2, 949 01 Nitra

Korešpondenčný autor: bajcan@atlas.sk

Len málo regiónov na Slovensku je poznačených antropogénnou baníckou činnosťou v takej miere ako oblasť stredoslovenských neovulkanitov [1]. Banská činnosť zanechala trvalé stopy nielen v oblasti Banskej Štiavnice, ale aj v širokom okolí. Práve v Ipeľskom regióne sú vplyvy minulosti na životné prostredie veľmi zreteľné. Súčasné environmentálne problémy Ipeľského regiónu významne súvisia s činnosťou, ktorá tu prebiehala v minulosti, čiže v čase, kedy sa formoval charakter územia [2]. V práci sme sledovali kvalitu dopestovanej rastlinnej produkcie z ohľadom na obsah vybraných rizikových prvkov v rokoch 2003 až 2006. Výsledky analýz poukazujú na nízku kvalitu dopestovaných poľnohospodárskych

plodín. U takmer 3/4 odobraných vzoriek sme zistili nadlimitné množstvá kadmia, pričom prekročenie limitných hodnôt sme zistili u všetkých druhov sledovaných plodín (obilniny, olejiny, krmoviny a strukoviny). Limitná hodnota pre obsah Cd bola prekročená až 14,6-násobne. Vysoké obsahy Cd v odobraných vzorkách sú dôsledkom vysokého obsahu tohto prvku v pôdach ako aj jeho vysokej mobility v pôde. Takmer 1/2 vzoriek mala nadlimitný obsah olova a limitná hodnota bola prekročená až 24,2-násobne. Na rozdiel od kadmia, nadlimitné množstvá Pb sme stanovili iba u obilnín a olejín. Vysoké obsahy Pb v odobraných vzorkách vyplývajú z mimoriadne vysokého obsahu olova v pôdach. Približne 30 % vzoriek malo nadlimitný obsah chrómu, pričom limitná hodnota bola prekročená max. 2,3-násobne a nadlimitné množstvá Cr sme zistili iba u krmovín a olejín. Vysoké obsahy olova a kadmia v rastlinných surovinách v Ipeľskom regióne zistili aj iní autori [3]. Na záver je možné konštatovať, že takmer tisícročná banská činnosť v oblasti Štiavnických vrchov má aj po jej ukončení mimoriadne negatívny vplyv na poľnohospodársku prvovýrobu v Ipeľskom regióne.

Tento príspevok vznikol vďaka finančnej podpore Grantovej agentúry SPU, grantu č. 719/05130.

- [1] TÓTH, T. - TOMÁŠ, J. - LAZOR, P. - CHLPÍK, J. - JOMOVÁ, K. - HEGEDUSOVÁ, A. 2005. Rizikové prvky v pôdach a plodinách štiavnického regiónu. In: *ChemZi*, roč. 1, 2005, č. 1, s. 285-286 ISSN 1336-7242
- [2] MUSILOVÁ, J. - STANOVIČ, R. - BYSTRICKÁ, J. - LAHUČKÝ, L. - TREBICHALSKÝ, P. 2005. Hygienický stav vybraných pôdnych predstaviteľov z hľadiska obsahu ťažkých kovov v regiónoch s lokálnym znečistením. In: *ChemZi*, roč. 1, 2005, č. 1, s. 110 ISSN 1336-7242
- [3] ÁRVAY, J. - MELICHÁČOVÁ, S. - LAHUČKÝ, L. - MUSILOVÁ, J. - BYSTRICKÁ, J. 2007. Kvalita plodín dopestovaných na pôde kontaminovanej ťažkými kovmi z Hontianskeho regiónu. In: *Bezpečnosť a kontrola potravín*. Nitra: SPU v Nitre, 2007, s. 115-118 ISBN 978-80-8069-860-7

### 5Po-Po12

#### VPLYV SÍRY NA FYTOTOXICITU ARZÉNU V SLEDOVANÝCH POĽNOHOSPODÁRSKYCH PLODINÁCH

R. STANOVIČ, L. HARANGOZÓ, J. ÁRVAY, J. ČÉRY

Katedra chémie, Fakulta biotechnológie a potravinárstva, SPU v Nitre, Tr. A. Hlinku 2, 949 01 Nitra

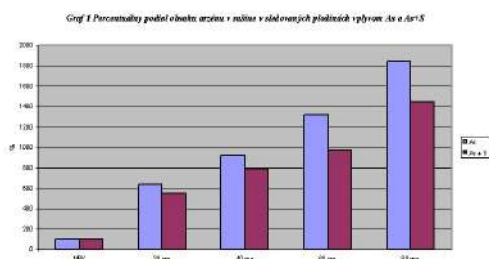
Korešpondenčný autor: radovan.stanovic@uniag.sk

Predmetom práce bolo sledovanie vplyvu síry na fyto-toxicitu arzénu. Pokusy sa realizovali v prirodzených podmienkach ako nádobové pokusy. Testovanej plodiny boli: jačmeň jarný, ovos siat, lucerna siata, bôb konský. Arzén sme aplikovali vo forme empirického roz-toku  $\text{Na}_3\text{AsO}_4$  a síru vo forme  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ . V sledovaných plodinách sa prejavil vplyv arzénu. Porovnali sme vplyv síry na všetky sledované plodiny. V postupnom dávko-vaní 20, 40, 60 a 80  $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$  As, S a As + S sme sle-dovali vplyv síry na hmotnosť fytomasy a obsah arzénu v sledovaných plodinách. Z výsledkov vyplýva pozitívny vplyv síry na znižovanie obsahu arzénu vo fytomase všetkých plodín. Jediný opačný príklad nastal v plodine bôb konský, kde sa v najvyššej dávke 80  $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$  As + S obsah arzénu v porovnaní s variantom so samostat-ným arzénom zvýšil. V grafe č.1 sú znázornené per-centuálne podiely obsahu arzénu vo všetkých štyroch sledovaných plodinách. Pozitívny vplyv síry na obsah arzénu poukazuje graf 1.

Vplyv arzénu na rôzne plodiny (ovos siaty, lucerna siata, jačmeň jarný, bôb konský) sme sledovali vytvorením syn-ergickej sústavy As + S. Stimulačný vplyv sústavy As + S na úrodu fytomasy sa prejavil úmerne potrebe tohto biogénneho prvku testovaným plodinám. Obsah arzénu sa vplyvom sústavy jednoznačne znižuje čo potvrdzuje aj keď nepriamo, predpokladanú funkčnosť aplikovanej síry.

Táto práca bola podporovaná projektami KEGA 3508107 a VEGA 1-3455-06.

- [1] TOMÁŠ, J. - VOLLMANNOVÁ, A. - BYSTRICKÁ, J. - BAJČAN, D. 2004. Ťažké kovy v produktívnych častiach rastlín. In: Výživa a potraviny pre tretie tisícročie „Spoločné stravovanie“ : zborník z vedeckej konferencie s medzinárodnou účasťou, Nitra 13.-14. október 2004, SPU, s. 234-227, ISBN 80-8069-421-4
- [2] BYSTRICKÁ, J. - TOMÁŠ, J. - MUSILOVÁ, J. 2006. Kontaminácia pôd Stredného Spiša kadmium, olovom a meďou. In: Environmentálne inžinierstvo (Zborník príspevkov z 3. vedeckej konferencie s medzinárodnou účasťou). Košice : TU 2006. s. 273. ISBN 80-8073-607-3



Percentuálny podiel obsahu arzénu v sušine v sle-dovaných plodinách vplyvom As a As+S

### 5Po-Po13

## HODNOCENÍ KAKAOVÉHO PRÁŠKU POMOCÍ VÍCEROZMĚROVÉ ANALÝZY DAT

A. VESELÁ<sup>1</sup>, M. MAREŠOVÁ<sup>1</sup>, M. SUCHÁNEK<sup>2</sup>, A. SYNITSYA<sup>1</sup>, J. COPIKOVA<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav chemie a technologie sacharidů, Technická 1905, 166 28 Praha 6

<sup>2</sup>Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav analytické chemie

<sup>3</sup>Vysoká škola chemicko-technologická Praha

Korešpondenčný autor: anezka.vesela@vscht.cz

Kakaový prášok je legislatívne definovaný ako potravina získaná z pražených kakaových bobů zbavených slupek, upravených do formy prášku. Využití kakaového prášku v dnešní době je velmi pestré. Uplatňuje se v potravinařství nejen jako samostatný výrobek, ale lze ho míchat s tuky k výrobě plev s čokoládovou příchutí, náplní, šlehaných hmot, tukových či máslových krémů, zmrzlin nebo k výrobě nejrůznějších směsí pro přípravu těst (např. tzv. kaka na pečení, jehož deklarované složení je kakaový prášek, mléčný cukr a modifikovaný pšeničný škrob). Velké množství produkce kakaového prášku je také využito na přípravu instantních nápojů, které se vyrábějí z cukru, kakaového prášku a lecitinu. Při výrobě čokolády se tradičně vychází z kakaové hmoty. Ke kakaové hmotě se pak přidává cukr, kakaové máslo, případně jeho náhrady. V poslední době se však dostává do popředí i technologie cukrovinek z kakaového prášku. V tom případě je výchozí surovinou kakaový prášek, cukr a náhrady kakaového másla. Objem výroby hmot a cukrovinek z kakaového prášku je srovnatelný s objemem výroby čokolády. Byl zpracován soubor 124 vzorků kakaového prášku. Vzorky byly nakoupeny převážně ve spotřebitelské síti v ČR. Do souboru byly zařazeny i vzorky nakoupené ve spotřebitelské síti Austrálie, Dánska, Německa, Portugalska, Řecka, Slovenska a Velké Británie. Dále byly do souboru zařazeny i vzorky určené pro průmyslovou výrobu, vzorek kakaové vlákniny, vzorek kaka pro přípravu instantního nápoje, vzorek směsi kaka a maltodextrinu a vzorek kaka na pečení. U všech kakaových prášků byl stanoven obsah tuku podle Soxhleta, obsah dusíku podle Kjeldahla, vlhkost sušením, obsah popela, pH, obsah theobrominu a kofeinu pomocí HPLC. Na základě naměřených DRIFT spekter ve viditelné oblasti byla stanovena barva pomocí  $L^*a^*b$  souřadnic. Vyhodnocení analytických dat vícerozměrovou analýzou umožnilo rozdělení kakaových prášků do několika skupin podle jejich vlastností. Také bylo ukázáno, že ne všechny kvalitativní vlastnosti souvisí se vzhledem (barvou) kakaového prášku.

Tato práce vznikla za podpory MŠMT ČR (MSM 6046137305).

**5Po-Po14****USE OF L-ASPARAGINASE FOR ACRYLAMIDE LEVEL REDUCTION IN POTATO FRIED PRODUCTS.**

K. KUKUROVÁ, C. BENEŠOVÁ, A. BEDNÁRIKOVÁ, Z. CIESAROVÁ

*Food Research Institute, Priemyselná 4, 82475 Bratislava*Korešpondenčný autor: *kukurova@vup.sk*

The impact of L-asparaginase on the acrylamide content reduction after high heat treatment (180 °C, 20 min) in a model system as well as in potato based material was investigated. The application of different amounts of enzyme (0-20 U.g<sup>-1</sup>) incubated at 20, 37, 50, 60, 70 °C respectively, were compared in systems simulating the composition of raw potatoes and subsequently in two varieties of fresh potatoes. It was found out that the addition of 20 U.g<sup>-1</sup> of enzyme at the temperature 37 °C and 60 minutes of incubation results in the highest elimination of acrylamide content (on 10 % of value without the enzyme addition). Amino acid asparagine decreasing which is a main precursor of acrylamide and aspartic acid producing by enzyme during process were also observed. Analytical technique headspace/GC/MS for acrylamide determination and LC/MS for amino acids measurement were used.

*This research was funded by a APVV grant No. COST-0015-06.***5Po-Po15****POROVNÁNÍ STUPNĚ VĚTVENÍ A ZASTOUPENÍ GLYKOSIDOVÝCH VAZEB BETA-GLUKANŮ RŮZNÉHO PŮVODU**

M. NOVÁK, B. KASÍKOVÁ, J. COPIKOVA

*Vysoká škola chemicko-technologická Praha*Korešpondenčný autor: *copikovj@vscht.cz*

Polymery beta-glukosy, beta-glukany, jsou sledovány zejména s hlediska jejich imunomodulačních účinků. Ty se liší jednak podle zdroje beta-glukanů, ale především podle jejich struktury - velikosti molekuly, zastoupení glykosidových vazeb a stupně větvení. V předkládané práci je porovnán stupeň větvení a zastoupení glykosidových vazeb beta-glukanů z obligátních přírodních zdrojů, makromycet a mikromycet (*Pleurotus ostreatus*, *Ganoderma lucidum*, *Saccharomyces cerevisiae*) a obilovin (různé druhy ječmene).

*Práce vznikla za podpory Výzkumného záměru MŠMT ČR č. 6046137305 a grantu GAČR č. 525/05/0273.***5Po-Po16****ŠTÚDIUM SEKUNDÁRNÝCH METABOLITOV IZOLOVANÉHO ENDOFYTICKÉHO MIKROORGANIZMU FUSARIUM SP.**

P. CIBÍKOVÁ, S. FIRÁKOVÁ, M. ŠTURDÍKOVÁ

*Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav biotechnológie a potravinárstva*Korešpondenčný autor: *petracibik@yahoo.com*

Fytochemikálie rastlín z čelade *Magnoliaceae* vykazujú antimikrobiálnu a protirakovinovú aktivitu, majú pozitívne psychoterapeutické a iné biologické účinky. Malá pozornosť sa venuje rastlinám tejto čelade ako zdroju endofytov so schopnosťou biosynteticky produkovať takéto bioaktívne látky.

V rámci experimentov boli izolované zo vzoriek rastlinných častí magnólie produkčné endofytické hýfomycéty *Fusarium sp.* Uskutočnili sme prieskum spektra produkovaných metabolitov. Študovali sme vplyv kultivačných podmienok (zdroj C a N) na produkciu sekundárnych metabolitov a testovali sme vplyv špecifického inhibítora polyketidových biosyntetických dráh(A). Pri testovaní biologických aktivít sme sa zamerali na inhibičný účinok mikrobiálnych extraktov na rast vybraných kvasinkových mikroorganizmov a baktérií, na inhibíciu aktivity lipoxygenázy, ktorá výrazne prispieva ku vzniku zápalov a alergií, ako aj na cytotoxický účinok.

Vzhľadom na produkciu sekundárnych metabolitov izolovaným endofytom sú lepším zdrojom uhlíka monosacharidy ako disacharidy. Komplexné zdroje dusíka pozitívne ovplyvnili rast produkčného kmeňa avšak nespôsobili očakávané zvýšenie produkcie sekundárnych metabolitov. Prídavkom aminokyselín a ich kombinácií ako prekurzorov sme zaznamenali zmeny v produkcii sekundárnych metabolitov. Vplyvom špecifického inhibítora polyketidových biosyntetických dráh (A) sme za daných kultivačných podmienok dosiahli trojnásobne zvýšenie produkcie sledovaných metabolitov. Bioautografickou metódou sa potvrdil antimikrobiálny účinok na grampozitívne baktérie *Bacillus subtilis* a kvasinky *Candida albicans*, *Trichosporoncutaneum* a *Cryptococcusneoformans*. Látky boli neúčinné na gramnegatívne baktérie *Escherichia coli*. Extrakty aj prečistené frakcie inhibovali aktivitu lipoxygenázy a vykazovali cytotoxickú aktivitu. Chromatografické záznamy z HPLC, TLC údaje ako aj spektrum antimikrobiálnej účinnosti nasvedčujú tomu, že extrakty izolovanej kultúry obsahujú skupinu látok s parametrami publikovanými pre fytochemikálie rastlín z čelade *Magnoliaceae*.

**5Po-Po17****INTERAKCE NANOŽELEZA S TĚŽKÝMI KOVY A JEJICH VYUŽITÍ V SANAČNÍCH TECHNOLOGIÍCH**

A. RODOVÁ, J. KUBRICHT, M. ČERNÍK

*Technická univerzita v Liberci, Hájkova 6, 461 17 Liberec*Korešpondenčný autor: *alena.rodova@vuanch.cz*

V oblasti sanace podzemní vody a horninového prostředí jsou intenzivně studovány možnosti využití nanoželeza při zachycování těžkých kovů. Nanočástice železa mohou být použity v elementární formě nebo povrchově pokryty dalším kovem, např. paladiem, platinou nebo niklem. Při aplikaci nanočástic do sanačních vrtů jich část ulpí na hornině, část je nesena podzemní vodou a sanuje tak oblast ve směru proudění. Podstatou sanačního procesu jsou redoxní děje na povrchu nanoželeza, při kterých se železo uplatňuje jako donor elektronů a kov jako akceptor, a následné srážecí a adsorpční pochody. Ve srovnání s běžně užívanými makročásticemi železa o velikosti několika mm (odpadní piliny, třísky), je výhodou nanočástic především reaktivnost a velký měrný povrch, přibližně 1 m<sup>2</sup>/g. V rámci projektu je sledována interakce nanočástic železa o velikosti do 80 nm od firmy TODA z Japonska s chromem a arzenem v modelových i reálných matricích. Laboratorní testy jsou koncipovány jako vsádkové nebo kolonové, in situ pilotní testy probíhají na vytipovaných lokalitách v České republice. Vstupní koncentrace kontaminantů se pohybuje od jednotek mg/l do 55 mg/l. Sledována je řada parametrů, především změny koncentrace kontaminantu, železa, síranů, dusičnanů, rozpuštěného kyslíku a oxidačně redukčního potenciálu. Cílem testů je stanovit optimální dávku nanočástic, posoudit podmínky ztráty reaktivity a prověřit kinetiku procesu. Optimální dávka nanoželeza pro téměř 100% odstranění šestimocného chromu se ve studované matrici v podmínkách laboratoře i pilotního testu pohybuje mezi 8 a 10 mg na mg chromu. Data z testů odstraňování arzenu jsou v současné době vyhodnocována.

*Autoři děkují za finanční podporu programu Výzkumné centrum Pokročilé sanační technologie a procesy ARTEC (1M4674788502) Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy České republiky.*

- [1] RODOVÁ, A., KUBRICHT, J. (2006): Využití nanočástic železa pro sanace II., zpráva o řešení dílčího úkolu směru 3-ST/Fe/ výzkumného centra Pokročilé sanační technologie
- [2] GILLHAM, R.W., BLOWES, D.W., PTACEK, D.J. AND O'HANNESIN, S.F. (1994): Use of zero-valent metals in in-situ remediation of contaminated ground water. Scientific Basis for Current and Future Technology, Part 2, 913-915
- [3] BLOWES, D.W., PTACEK, C.J. AND JAMBOR, J.L. (1997): In-situ remediation of chromate contaminated groundwater using permeable reactive

walls. Environmental Science and Technology  
31:3348-3357

**5Po-Po18****STANOVENIE KYSELINY MANDĽOVEJ V MOČI PRACOVNÍKOV EXPONOVANÝCH STYRÉNU U VYBRANÝCH PRACOVNÝCH ČINNOSTÍ PRI VÝROBE SKLOLAMINÁTOV .**

M. POLÁKOVÁ

*Regionálny úrad verejného zdravotníctva so sídlom v Trenčíne*Korešpondenčný autor: *polakova@ruvztn.sk*

Špecifický spôsob biologického monitorovania expozície chemickej látky predstavuje biologický expozičný test (BET). Biologický expozičný test pri expozícií styrénu je stanovenie kyseliny mandľovej (KM) v moči pracovníkov. Indikatívna biologická medzná hodnota (IBMH) pre kyselinu mandľovú v moči je 4200  $\mu\text{mol.l}^{-1}$ . Najvyššia expozícia styrénu pracovníkov vzniká počas výroby sklolaminátových vystužených polyesterových produktov, kde nenasytené polyesterové živice obsahujú 40% styrénu. 85 % absorbovaného styrénu sa vylučuje ako kyselina mandľová (KM) a 10 % ako kyselina fenylglyoxylová. Kyselina mandľová patrí do skupiny metabolitov s krátkym polčasom vylučovania, ktorý je 4-6 hodín. Vzorky boli odoberané na konci pracovnej zmeny, na konci pracovného týždňa a analyzované HPLC systémom Varian. Pracovníci vykonávajú počas výroby sklolaminátov rôzne pracovné činnosti, pri ktorých metabolizujú KM v rôznych koncentráciách. V rokoch 2004, 2005, 2006 bolo spolu analyzovaných 231 vzoriek. Najvyššie koncentrácie KM boli zistené pri ručnom laminovaní (37prac.) až 7516  $\mu\text{mol/l}$ , u 9 pracovníkov bola dokonca prekročená IBMH. Striekanie formy (10prac.), hodnoty KM boli do 4103,2  $\mu\text{mol/l}$ . Gelcoat - mokrý orez (11prac.) hodnoty KM boli do 4163  $\mu\text{mol/l}$ . Pri leštení, matovaní, dokončení boli zistené najnižšie koncentrácie KM do 2837,3  $\mu\text{mol/l}$ . Pracovníci výstupnej kontroly (12prac.) nemetabolizovali KM v moči, čo zodpovedá ich pracovnej činnosti. Výsledky stanovenia kys. mandľovej poukazujú na významnú expozíciu pracovníkov pri vyššie uvedených pracovných činnostiach. Vykonávanie BET je dôležité pre celkové posúdenie miery rizika poškodenia zdravia pracovníkov exponovaných chemickým látkam v pracovnom procese.

- [1] Laffon, B., Lema, M., Mendez, J., Journal of Chromatography B, 753 (2001) 385-393
- [2] Ogata, M., Taguchi, T., Inter Arch of Occupational Environmental Health (1988) 61: 131-140
- [3] Buchancová, J., a kol., Pracovné lekárstvo a toxikológia, Osveta 2003 s.25,90,100

**5Po-Po19****VÝVOJ RYCHLÉ A SPECIFICKÉ  
IMUNODETEKCE LISTERIA  
MONOCYTOGENES**

M. BLAŽKOVÁ, L. FUKAL, P. RAUCH, K. DEMNEROVÁ

*Ústav biochemie a mikrobiologie, VŠCHT Praha*Korešpondenčný autor: *m.blazkova@vscht.cz*

*Listeria monocytogenes* je jedním z nejnebezpečnějších patogenů v potravinářském průmyslu. Požití potravy kontaminované touto bakterií může vést u rizikových skupin (těhotné ženy, staří lidé, děti, osoby s oslabenou imunitou) k velmi závažnému a často i smrtelnému onemocnění - listerióze. Normou předepsaným způsobem stanovení *Listeria monocytogenes* v potravinách je klasická kultivační metoda. Jelikož jde o metodu poměrně časově náročnou (5-8 dnů) a včasná diagnostika je vzhledem k progresivnímu průběhu onemocnění listeriózou velmi důležitá, je v posledních letech vyvíjen značný tlak na vývoj rychlých screeningových metod.

V této práci jsme se zaměřili na vývoj imunodetekčních metod na principu dipstiku a imunochemické metody na nitroceluloseové membráně s využitím molekulárně-genetického principu. Mezi přednosti imunochemických a molekulárně-genetických postupů detekce patří jejich specifita a jednoduchost provedení. Předností je rovněž možnost stanovení velkého počtu vzorků současně.

Vyvinuté metody byly ověřovány na uměle kontaminovaných vzorcích mléka. Vzorky byly kultivovány 24 až 48 h a po té analyzovány oběma metodami. Nejprve byl vyloučen vliv matrice mléka na průběh detekce. Následně bylo ověřeno, že jiné bakterie nemají vliv nejen na stanovení listerií ve vzorku, ale ani na jejich nárůst ve vzorku kontaminovaném jinými bakteriemi. Na závěr byl proveden malý screening většího množství uměle připravených vzorků, kde se podařilo určit všechny správně. Vyvinuté metody detekce jsou v porovnání s kultivačními metodami rychlejší; výsledky testů jsou známy nejpozději do 2-3 dnů.

*Tato práce byla financována z prostředků Národního programu výzkumu II 2B06048 a MŠMT ČR grant MSM 6046137305.*

- [1] Karamonová L., Blažková M., Fukal L., Rauch P., Greifová M., Horáková K., Tomáška M., Roubal P., Brett G. M., Wyatt G. M.: *Food Agric. Immunol.* 15, 167 (2003).

**5Po-Po20****PRODUKCIA BIOAKTÍVNYCH LÁTOK  
EPIFYTICKÝMI AKTINOMYCÉTAMI  
IZOLOVANÝMI Z TAXUS SP.**

M. MARUNA, M. ŠTURDÍKOVÁ

*Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav biotechnológie a potravinárstva*

Korešpondenčný autor: *michal.maruna@stuba.sk*

V počiatočnom skríningu sme izolovali niekoľko epifytických kmeňov aktinomycét z koreňového systému a pletív *Taxus baccata*, zdroja protinádorových taxánov. Taxol sa vyskytuje vo všetkých druhoch tisov, avšak jeho podiel v týchto rastlinách je veľmi nízky. Preto objavenie mikroorganizmu schopného produkovať taxány v dostatočnom množstve by vyriešilo nedostatok súčasných prírodných zdrojov.

Naša práca sa zaoberá optimalizáciou podmienok vhodných pre rast epifytického mikroorganizmu a pre produkciu sekundárnych metabolitov s cytotoxickou aktivitou so zameraním sa na zvyšovanie produkcie prídavkom doplnkových komponentov živného média v rôznych fázach rastu izolovaného kmeňa aktinomycét. Charakterizácia a selekcia mikrobiálnych kmeňov bola realizovaná pomocou chemickej analýzy a určovaním biologickej aktivity organických extraktov. Biologickú aktivitu sme hodnotili testovaním mikrobiálnych extraktov s inhibičným účinkom na aktivitu cysteínovej proteinázy katepsín B, enzým spojený s bujením nádorových buniek. Na základe výsledkov analýz a testov sme predpokladali, že päť kmeňov aktinomycét tvorí taxánové metabolity. Výskyt taxánov vo vzorkách extraktov médií kultúr sme potvrdili v testoch s monoklonálnymi protilátkami a HPLC.

Zloženie kultivačného média malo veľký vplyv na biosyntézu sekundárnych metabolitov vybraného izolovaného kmeňa MM053. Dosiahli sme produkciu niekoľko stoviek  $\mu\text{g}$  taxolu na liter kultivačného média, čo predstavovalo takmer desaťnásobné zvýšenie použitím vhodných nutričných zdrojov.

Sledovaný kmeň MM053 môžeme zhodnotiť podľa dosiahnutých výsledkov ako perspektívny pre produkciu bioaktívnych metabolitov s charakteristikami taxánových látok.

**5Po-Po21****VLIV ACYLGLYKOSIDŮ NA VYBRANÉ KMENY MIKROORGANISMŮ**T. KARLOVÁ<sup>1</sup>, L. POLÁKOVÁ<sup>2</sup>, J. ŠMIDRKAL<sup>3</sup><sup>1</sup>Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Fakulta potravinářské a biochemické technologie, Ústav technologie mléka a tuků<sup>2</sup>Vysoká škola chemicko-technologická, Fakulta potravinářské a biochemické technologie, Ústav technologie mléka a tuků<sup>3</sup>Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 3, Praha 6, 166 28

Korešpondenčný autor: tereza.karlova@vscht.cz

Současným trendem v potravinářství je snaha co nejvíce snížit obsah syntetických aditiv. Jedním z možných řešení je nahrazení konzervačních látek sloučeninami na bázi mastných kyselin a jejich derivátů. Estery mastných kyselin s polyoly patří mezi neionické tenzidy a jsou běžně používány v potravinářském, kosmetickém a farmaceutickém průmyslu. Mají vysoké emulgační, stabilizační a detergenční účinky a zároveň projevují antimikrobiální aktivitu vůči širokému spektru mikroorganismů [1]. Tyto látky se běžně vyskytují v přírodních produktech a v lidském těle se působením hydrolas rozkládají na stejné látky jako běžně konzumované potraviny. Mechanismus inhibičních účinků mastných kyselin a jejich derivátů na mikroorganismy není dosud přesně znám. Povrchově aktivní látky ve vyšších koncentracích způsobují poškození cytoplazmatických membrán, které vedou až k usmrcení buňky [2]. K inhibici růstu mikroorganismů dochází důsledkem změny buněčné permeability. Lipidová dvojvrstva membrán mikroorganismů je tedy primárním cílem účinku mastných kyselin a jejich derivátů [3]. Cílem této práce bylo otestovat antimikrobiální vlastnosti různých koncentrací vybraných mastných kyselin a jejich esterů na modelových kmenech mikroorganismů. Ke stanovení antimikrobiální aktivity testovaných látek byla použita spektrofotometrická metoda. Kultivace mikroorganismů byla prováděna v tekutém mediu s přidávkou testovaných látek v mikrotitračních destičkách, ve kterých zároveň probíhalo měření absorbance pomocí přístroje Power-Wave XS. Byly změřeny růstové křivky testovaných kmenů kultivovaných v tekutém mediu v mikrotitračních destičkách s přidávkou inhibičních látek. Z výsledků je patrné, že v přítomnosti inhibičních látek dochází k prodloužení lag fáze růstu mikroorganismů a ke snížení nárůstu kultury.

- [1] Bergsson G., Arnfinnsson J., Steingrímsson Ó., Thormar H.: In vitro killing of *Candida albicans* by fatty acids and monoglycerides, *Antimicrobial Agents and Chemotherapy* 45, 3209 - 3212 (2001).
- [2] Šilhánková L.: *Mikrobiologie pro potravináře a biotechnologii*. Victoria Publishing, Praha 1995.
- [3] Avis T. J., Bélanger R. R.: Specificity and mode of action of the antifungal fatty acid cis-9-

heptadecenoic acid produced by *Pseudozyma flocculosa*, *Applied and Environmental Microbiology* 67 (2001).

**5Po-Po22****USAGE OF DNA REPAIR ENZYMES FOR DETECTION OF DNA BASE DAMAGE INDUCED BY MUTAGENIC AND GENOTOXIC COMPOUNDS**J. ČERVENÝ<sup>1</sup>, Z. PAVLÍČKOVÁ<sup>2</sup>, K. MALACHOVÁ<sup>2</sup>, P. PEČINKA<sup>2</sup><sup>1</sup>Přírodovědecká fakulta Ostravské univerzity v Ostravě<sup>2</sup>Katedra biologie a ekologie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita v Ostravě, 30 dubna 22, 701 03, Ostrava

Korešpondenčný autor: R06626@student.osu.cz

Mutagenic compounds from natural or artificial sources capable to interact with nucleic acids more and more burden the environment. Knowledge of character of possible genetic damage is important for determination of biological risk. In this work, we studied reactions of compounds selectively reacting with bases within single-strand (ss) or double-strand (ds) DNA regions. Such reactions lead only to base modification, not to sugar-phosphate backbone cleavage. On the other hand a sugar-phosphate backbone in the site of modification is much more sensitive towards some chemicals and is specifically cleaved in these sites (e.g. piperidine - which is used in Maxam-Gilbert sequencing method DNA for specific cleavage of nucleic acids in the site of modification).

To detect modified bases we used DNA repair protein in our study. These enzymes are part of cell reparation systems. They are able to distinguish and remove bases damaged in different ways (e.g. as a result of oxidative stress). Removing of damaged base usually leads to interruption, which changes topology of circular plasmid DNA. In the consequence of the phosphodiester bond cleavage the molecule of plasmid DNA undergoes the transitions from supercoiled (scDNA) to open circular (ocDNA) form. Conformational changes can be easily detected using gel electrophoresis: ocDNA form due to its lower compactness exhibits lower electrophoretic mobility than scDNA.

In our study we focused on the detection of the base modification by osmium tetroxide complexes or diethylpyrocarbonate. Several DNA repair proteins were used for detection of modification: T7 endonuclease I, endonuclease III, endonuclease IV, endonuclease V, endonuclease VIII and FPG. We tested applicability of individual enzymes for detection of base damage by different chemical compounds. The studies are important especially for understanding of damage pattern and DNA repair mechanism.



**5Po-Po23****PLANT PEPTIDASES PAPAINE AND BROMELAIN AND THEIR APPLICATION IN FOOD PROCESSING**

E. SENDREJOVÁ<sup>1</sup>, M. KARAMAC<sup>2</sup>, A. KOSINSKA<sup>2</sup>, R. AMAROWICZ<sup>2</sup>, D. URMINSKÁ<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Faculty of Biotechnology and Food Sciences Slovak Agricultural University in Nitra

<sup>2</sup>Division of Food Science Institute of Animal Reproduction and Food Research PAN Olsztyn

<sup>3</sup>Slovenská poľnohospodárska univerzita v Nitre

Korešpondenčný autor: [dana.urminska@uniag.sk](mailto:dana.urminska@uniag.sk)

Hydrolysates of plant proteins are significant alternative to primary commodities used for preparing special dietetic foodstuffs e.g. in nutrition of individuals with phenylketonuria and celiac disease. The aim of this work was to determine a degree of hydrolysis and the molecular weight of hydrolysates obtained of individual protein fractions of wheat - albumins and globulins, gliadins, glutenins by papain and bromelain activity. These peptidases are used mainly in the meat industry for meat tenderization, in the beer industry for elimination of cool turbidity of beer, as well as in the cheese industry for improving foaming of whey proteins and foam stability.

The enzymatic treatment was carried out by an addition of 15mAU per gram of proteins at 50°C, pH of 8.0 for papain and pH of 5.5 for bromelain during 120 minutes. By using pH-stat and OPA methods a degree of hydrolysis was determined - in the papain hydrolysates of albumins and globulins (2.06% and 3.29%), gliadins (0.65% and 0.54%) and glutenins (3.03% and 3.12%) and in the bromelain hydrolysates of albumins and globulins (6.43% and 8.06%), gliadins (3.59% and 3.63%) and glutenins (4.26% and 7.56%). Albumins and globulins are the best enzymatically hydrolysable protein fraction while gliadins are least split by enzymes. Comparison of the action of enzymes showed that bromelain has a better hydrolytic efficiency than papain.

Qualitative analysis of the products with the use of chromatography 2D-TLC and SE-HPLC showed that high-molecular peptides with Mr higher than 20kDa and low-molecular peptides with Mr 555-369Da predominate in hydrolysates.

*This work was supported by programme of research and development No. 2003SP270280E010280E01.*

**5Po-Po24****DETECTION OF TAR IN PAVEMENT ASPHALT**

P. PÁNEK<sup>1</sup>, K. MALACHOVÁ<sup>2</sup>, Z. LACNÝ<sup>1</sup>, Z. PAVLÍČKOVÁ<sup>2</sup>, L. GAZURKOVÁ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemistry, Faculty of Metallurgy and Material Engineering, VSB-Technical University Ostrava, 17.listopadu 15, 708 00 Ostrava

<sup>2</sup>Katedra biologie a ekologie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita v Ostravě, 30 dubna 22, 701 03, Ostrava

Korešpondenčný autor: [petr.panek@vsb.cz](mailto:petr.panek@vsb.cz)

In the past in almost every European country tar has been used in road construction. A considerable amount of tar-containing binders can be still present in the recycled asphalt. The detection and determination of coal tar in asphalt pavement material has gained increasing importance in the field analysis. This presentation describes the qualitative and semiquantitative determination of tar by use of phenol and PAHs as markers, because their content in tar is 10 000 times higher than in bitumen.

The solvent extraction and thin-layer chromatographic separation of phenols on silica gel sheets with chemical detection have been investigated in different eluent systems.

Following the selective isolation, solutions were screened for PAH contamination by use of UV-spectrophotometry. The linear calibration curves allowed the assessment of PAH contamination with greater accuracy and enables the estimation of PAH over a broad concentration range. Preliminary results of our tests show very good agreement with data obtained by use of high-performance liquid chromatography.

Extracts of tar-containing binders into dimethylsulfoxide were assayed for mutagenicity by use of the SOS Chromotest and Ames test. Combination of mentioned tests allowed identification of frameshift, substitution mutations and induction of SOS reparations. Positive mutagenic response required a metabolic activation in vitro with hepatic fraction S9.

The obtained results show that mutagenic effect was induced thanks to presence of PAHs and their derivatives.

*This research was supported by the Czech Science Foundation, project GACR 104/05/2296.*

**5Po-Po25****MOŽNOSTI STABILIZÁCIE JEDLÝCH TUKOV POČAS MIKROVLNNEHO OHREVVU**

L. JANÁČ, S. SEKRETÁR, Š. SCHMIDT, L. ZAHRADNÍKOVÁ

Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav biotechnológie a potravinárstva

Korešpondenčný autor: [lukas.janac@stuba.sk](mailto:lukas.janac@stuba.sk)

Oxidácia tukov je hlavným faktorom ich degradácie a je spojená so senzorickými, ekonomickými a zdravotnými problémami. Preto je na mieste otázka stabilizácie tukov počas oxidačného stresu. Pokles organoleptických a výživových vlastností je spojený s tvorbou primárnych a sekundárnych oxidačných produktov. Hydroperoxydy, ako primárne produkty, sú nestále a ľahko sa rozkladajú, preto sa používajú najmä na určenie počiatočného stavu oxidácie. Oxidácia polynenasýtených mastných kyselín je spojená s nárastom absorpcie v UV oblasti spektra. Mastné kyseliny s konjugovaným systémom dvojitých väzieb majú absorpčné maximum pri 232-234 nm (diény) a 268-270 nm (triény). Prítomnosť sekundárnych produktov oxidácie je možné sledovať meraním hodnôt p-anizidínového čísla v oxidovanom materiále. Ako akcelerátor oxidácie pôsobí vplyv zvýšenej teploty, svetla, prítomnosť kovov, fotosenzibilizátorov, aktívnych foriem kyslíka a iné. Mikrovlnný ohrev patrí k obľúbeným kulinárnym technikám. Tvorba tepla je zabezpečená interakciou elektromagnetického poľa a polárnych zložiek potravín. Tieto zložky sú nútené meniť svoju rotáciu s frekvenciou mikrovln, čím dochádza k ich ohrevu. Mikrovlnný ohrev, v porovnaní s konvenčným, má bezpochyby množstvo výhod. Šetrí čas, energie a mikrovlnné rúry sa jednoducho ovládajú. Na druhej strane sú námietky kvôli rozkladu niektorých nutritívne dôležitých zložiek. Predpokladá sa katalytický účinok mikrovlnného žiarenia na niektoré chemické reakcie. Nežiadúcim reakciám počas oxidácie tukov možno zabrániť resp. ich spomaliť elimináciou vyššie uvedených faktorov alebo použitím vhodných antioxidantov. V poslednej dobe sa uprednostňuje používanie antioxidantov izolovaných z prírodných materiálov. Dobré antioxidantné vlastnosti vykazujú polyfenolické zlúčeniny, ktorých bohatým zdrojom sú rozmarín a šalvia.

*Táto práca bola uskutočnená s finančnou podporou grantu VEGA 1/2392/05.*

- [1] Angelo, A. J. S.: Lipid oxidation in foods. Crit. Rev. Food Sci. Nutr. 36, 1966, s. 175-224.
- [2] Gordon, M. H.: The mechanism of antioxidant action in vitro. In: Hudson B. J. F.: Food antioxidants. Elsevier Applied Science Publishers, London 1990, s.1- 18.
- [3] Galema, A. A.: Microwave chemistry. Chem. Soc. Rev. 26, 1997, s. 233-238.

## Postery – sekcia 6

### 6Po-Po1

#### OXYCELULOSA JAKO NOVÁ POMOCNÁ LÁTKA PŘI FORMULACI TABLET

J. GAJZDIOK<sup>1</sup>, Z. CHALUPOVÁ<sup>2</sup>, R. MASTEIKOVÁ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>UTL FaF

<sup>2</sup>VFU Brno

Korešpondenčný autor: *gazi007@seznam.cz*

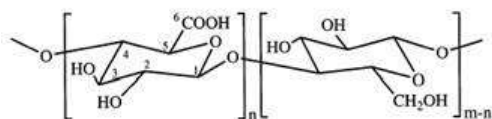
Za dlhou históriou používání tablet ve farmácii, prošla tato léková forma mnoha změnami, s jasným cílem zlepšit přívod léčiva do organizmu pacienta. I přes dlouhodobý vývoj si tabletová léková forma zachovala v principu téměř stejný nebo jen esteticky upravený tvar a způsob podání. Použití nových nebo upravených pomocných látek však umožnilo využití tablet jako systémů řídicích uvolňování a účinek léčivé látky v organizmu.[1] Jednou z nejdůležitějších pomocných látek je celulóza a její deriváty typu esterů a etherů, které se po dlouhou dobu využívají ve farmaceutické technologii jako pomocné látky ve funkci pojiv, rozvolňovadel, plniv, látek modifikujících uvolňování atd.[2] Dalším celulosovým derivátem, jež v sobě skrývá možnosti technologického uplatnění je právě oxycelulóza, jež je ve farmaceutické technologii dosud nepoužívanou látkou a jejíž unikátní schopnost biodegradovatelnosti a další vlastnosti (zástava krvácení, zabraňování srůstu tkání, antimikrobní aktivita...) umožňují její aplikace v řadě medicínských odvětví.[3]

Ústav technologie léků VFU Brno se v návaznosti na dřívější výzkumy týkající se použití inovativních pomocných látek, zabývá hodnocením potenciálních možností využití oxycelulosity (dodané firmou Synthesia a.s.) jako pomocné látky při formulaci pevných i polotuhých lékových forem. Experiment je zaměřen na srovnání několika oxycelulosových typů s prakticky využívanými pomocnými látkami, zhodnocení jejich přínosů jako pojiva, rozvolňovadla či plniva při přípravě tablet a v návaznosti na získané výsledky také použití oxycelulosity v moderních terapeutických systémech. U připravených vzorků se hodnotila kvalita tabletoviny - tokové vlastnosti (sypnost, sypná a setřesná hustota, Hausnerův faktor) a mechanické vlastnosti tablet - pevnost, rozpad, oděr dle platného ČL 2005 a Doplňku 2006.

*Tento projekt byl realizován za finanční podpory z prostředků státního rozpočtu prostřednictvím Ministerstva průmyslu a obchodu (projekt ev. č. 2A-ITP1/073) a prostředků čerpaných v rámci grantu IGA VFU Brno 65/2007/FaF - Využití oxycelulózy jako pomocné látky při formulaci tablet a prostředků věnovaných firmou Pfizer spol. s r.o.*

- [1] Vetchý D., Ceral J.: Moderní perorální lékové formy používané v neurologii, Neurologie pro praxi, 4, 2005, s. 218 - 220.
- [2] Sedláková M., Rabišková M., Spilková J.: Přírodní polymery pro formulaci hydrofilních matricových tablet, Česká a slovenská farmacie 2006, 55, s. 4-11.

- [3] Stillwell, R. L., et al.: Oxidized cellulose: Chemistry, processing and medical applications, Handbook of Biodegradable Polymers, A. J. Domb, J. Kost, and M. W. Wiseman (eds.). London: Harwood Academic Publishers, 1997, p. 291-306.



Vzorec oxycelulosity

### 6Po-Po2

#### EFFECT OF SURFACE MODIFICATION OF PET FIBRE MATERIALS TO THEIR MECHANICAL PROPERTIES

A. MURÁROVÁ<sup>1</sup>, S. PODOBEKOVÁ<sup>1</sup>, M. JAMBRICH<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Slovak University of Technology in Bratislava, Faculty of Chemical and Food Technology

<sup>2</sup>Trenčianska univerzita, Fakulta priemyselných technológií, Katedra chémie a technológie polymérov a textílu

Korešpondenčný autor: [anna.murarova@stuba.sk](mailto:anna.murarova@stuba.sk)

The surface modification designed for change of functional properties can occur by various physical and chemical procedures. Currently, research centers focus on nano-technological procedures when it comes to surface modifications of fibre materials. The nano-technological procedures reform surfaces in nano-layers. Such deliberately prepared nano-layer is a carrier of new functional properties while the basic physical and chemical properties of the carrier - fibre material remain the same. Our paper deals with the surface modification of the polyethyleneterephthalate (PET) fibre materials and its effect to their mechanical properties. The surface modification occurred by creation of a thin Si(OR)<sub>4</sub> layer by sol-gel method in interaction with nano-pigments. Such management of surface modification gives the PET fibre material wetting ability and qualitatively new electrical properties. Furthermore, the paper deals with the degree of change of basic mechanical properties of PET fibre materials in dependence from the above mentioned nano-technological procedures.

This work was financially supported by grant from the Ministry of Education of the Slovak Republic No. VEGA 1/2451/05.

- [1] Textor T., Bahners T., Schollmeyer E.: 45, 169-172 (2002).
- [2] Amberg-Schwab S., Katshorek H., Weber M., Burger A.: J. Sol-Gel Sci. Technol. 26, 699 (2003).

### 6Po-Po3

#### VÝVOJ NOVÉ TECHNOLOGIE PRO PŘÍPRAVU PERORÁLNÍCH LÉKOVÝCH FOREM VYŠŠÍCH GENERACÍ

D. VETCHY, L. ZEDKOVÁ, M. ŠVARCOVÁ, M. RABIŠKOVÁ

Ústav technologie léků, Farmaceutická fakulta, Veterinární a farmaceutická univerzita Brno

Korešpondenčný autor: [vetchy@email.cz](mailto:vetchy@email.cz)

V současné době je veliký zájem o lékové formy vyšších generací umožňující řízené uvolňování anebo řízenou biodistribuci léčiva<sup>1</sup>. Tyto moderní přípravky nabízejí řadu výhod oproti klasickým perorálním lékovým formám (odstranění kolísání hladiny léčiva v krvi, zjednodušení dávkování a tím zvýšení „patient compliance“, aj.). Zefektivňují tak terapii a snižují nežádoucí účinky léčiva.

Jedním z vhodných poloproduktů pro přípravu perorální lékové formy vyšší generace jsou pelety, sférické částice složené z léčiva a pomocných látek, které vytvářejí vlastní lékovou formu naplněním do tobolek nebo slisováním do tablet.

Rotoprocessor multifunkčního zařízení Aeromatic MP 1 (Švýcarsko) umožňuje připravovat pelety jednou z nejmodernějších technologií<sup>2</sup>. Kromě výroby pelet rotační aglomerací nabízí toto zařízení také přípravu pelet vrstvením roztoku nebo suspenze léčiva na neaktivní jádra. Zařízení neumožňuje vrstvit léčivou látku ve formě prášku. Technologie vrstvení prášku léčivé látky je zvlášť výhodná u látek špatně rozpustných ve vodě<sup>3</sup>.

Cílem experimentální práce bylo vyvinout a optimalizovat technologii vrstvení prášku léčiva na neaktivní jádra v rotoprocessoru. Splnění tohoto cíle vyžadovalo upravení stávajícího přístroje o zařízení umožňující přívod léčiva ve formě prášku požadovanou rychlostí.

Podarilo se sestavit zařízení umožňující přívod prášku léčiva požadovanou rychlostí do rotoprocessorové jednotky a s tímto zařízením vyvinout a optimalizovat novou technologii pro přípravu peletové lékové formy vrstvením prášku léčiva na neaktivní jádra. Optimalizace technologického postupu se provedla řadou pokusů, ve kterých se sledoval vliv celkového množství, typu a koncentrace roztoku pojivové pomocné látky, vliv rychlosti dodávání prášku a vliv druhu a celkového množství kluzné pomocné látky na vlastnosti vyrobených pelet.

Projekt byl realizován za finanční podpory firmy Pfizer spol. s r.o. a Zentiva a.s.

- [1] Masteiková R., Chalupová Z., Šklubalová Z.: Stimuli-sensitive hydrogels in controlled and sustained drug delivery, *Medicina* 2003, 39(2), 19-24.
- [2] Vetchý D., Rabišková M.: Some variables influencing rotoagglomeration in the multiprocessor MP-1,

International Journal of Pharmaceutics 2002, 242, 353-356.

- [3] Švarcová M., Vetchý D.: Příprava pelet vrstvením léčivé látky na inaktivní jádra v rotoprocesoru, Česká a slovenská Farmacie 2007, 56(2), 67-72.



Rotoprocessor multifunkčního zařízení Aeromatic MP 1 s nainstalovaným práškovým dopravníkem

#### 6Po-Po4

### ROZKLADY KVARTERNÍ BÁZE ODVOZENÉ OD N,N-DIMETHYL-2-AMINOETHANOLU

M. ZAPLETAL, J. TREJBAL, M. PETRISKO, J. PAŠEK

Vysoká škola chemicko-technologická Praha

Korešpondenční autor: zapletam@vscht.cz

Tato práce se věnuje studiu rozkladu kvarterní amoniové báze, identifikaci produktů tohoto rozkladu a návrhu mechanismů jejich vzniku. *N,N*-dimethyl-2-aminoethanol (DMAE) se vyrábí hydroxyethylací dimethylaminu (DMA) ethylenoxidem (EO). Kromě DMAE však dochází také ke vzniku dalších látek, např. reakcí DMAE s další molekulou EO vzniká *N,N*-dimethyl-2-(2-hydroxyethoxy)ethylamin (DMEA-EG). Mnohem zajímavějšími vedlejšími produkty jsou však kvarterní báze *N,N*-bis(2-hydroxyethyl)dimethylamonium-hydroxid (QB-DMAE), která vzniká hydroxyethylací na dusíku DMAE a další kvarterní báze od ní odvozené. Tyto kvarterní amoniové báze podléhají následným reakcím nebo

intramolekulárním přesmykům (např. Hoffmanova eliminace) za vzniku dalších látek, jakými jsou např. již zmíněný DMAE-EG, 1,4-dioxan (DOX), acetaldehyd, *N,N*-dimethyl-2-(methoxy)ethylamin (DMEA-M), *N*-methyl-*N*-(2-hydroxyethyl)-aminoethanol (MDEA), 2-(vinylxy)ethanol (VOX) a další.

#### 6Po-Po5

### MODELOVÝ POPIS REAKCE OXIDU ZINEČNATÉHO SE SULFANEM ZAHRNUTÍ POROZITU PRODUKTU

P. ČERMÁK<sup>1</sup>, V. GLASER<sup>1</sup>, J. VÍDENSKÝ<sup>2</sup>, I. SEDLÁŘOVÁ<sup>3</sup>, V. FÍLA<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústav anorganické technologie, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6

<sup>2</sup>VŠCHT Praha

<sup>3</sup>VŠCHT Praha, Ústav anorganické technologie

Korešpondenční autor: Ivona.Sedlarova@vscht.cz

Problematika odsiřování plynů, kde síra je přítomna jako sulfan, je rozhodující z hlediska následných katalytických nebo spalovacích procesů. Jedna z možných cest je využití chemisorbentů na bázi oxidu zinečnatého. Jeho reakce se sulfanem má velký význam pro moderní odsiřovací procesy vzhledem k dosažení velmi vysokého stupně odsíření. Je výhodné využít ho v koncových stupních při odsiřování horkých plynů, po hydrogenaci nebo hydrolyze organických sirných sloučenin přítomných v zemním plynu, čištění bioplynu atd. Práce vychází z již dříve provedených měření s úzkou frakcí zrn oxidu zinečnatého v izotermním průtočném reaktoru s modelovou plynou směsí obsahující dusík, vodík a sulfan. Provedené výpočty pro počátky reakce ukázaly, že lze zanedbat pokles koncentrace sulfanu směrem do středu zrna. Všechny krystality v zrně reagují tedy za stejných podmínek. K popisu systému byl v předchozích pracích použit model nezreagovaného jádra za předpokladu konstantní a měnící se velikosti krystalitů v důsledku probíhající chemické reakce. Odvozené vztahy umožnily vypočítat průběh reakčních izoterm. Získaným experimentálním datům lépe vyhovoval vztah pro model s měnící se velikostí krystalitů. Pro výstižnější popis studovaného systému je v předložené práci uvažován model zvětšující se velikosti krystalitů s měnící se porozitou vznikajícího sulfidu zinečnatého během sulfidace. Při jeho odvození se vycházelo z předpokladů, že zrno sorbentu nemění během sulfidace svůj objem a každý krystalit v zrně tak zvětšuje svůj objem na úkor porézního prostoru. Do odvozené diferenciální rovnice byla dosazována změna porozity během reakce, která byla zjišťována experimentálně rtuťovou porozimetrií. Odvozená rovnice nemá analytické řešení, proto bylo

použito numerického postupu. Aplikace tohoto modelu na popis reakčních izoterem ukázala, že průběh sulfidace vystihuje nejlépe ze všech dosud použitých modelů.

*Tato práce vznikla s finanční podporou výzkumného záměru MSM 6046137301.*

- [1] O. Levenspiel, *Teorie a výpočty chemických reaktorů*, SNTL Praha (1967)
- [2] L.A. Fenonil, S. Lynn, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 35, 1024-1043, (1996)
- [3] P.A. Webb, C. Orr, *Analytical Methods in Fine Particle Technology*, Micromeritics (1997)

#### 6Po-Po6

### ANALYZÁTOR PRO RYCHLÉ STANOVENÍ DEHTŮ V PLYNU ZE ZPLYŇOVÁNÍ BIOMASY

P. KAMENÍKOVÁ<sup>1</sup>, S. SKOBLJA<sup>2</sup>, M. VOSECKÝ<sup>1</sup>, M. POHOŘELÝ<sup>1</sup>, M. PUNČOCHÁŘ<sup>1</sup>, B. KOUTSKÝ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>ÚCHP AV ČR, v.v.i.

<sup>2</sup>Ústav plynárenství, koksochemie a ochrany ovzduší, VŠCHT Praha

Korešpondenční autor: [hejdova@icpf.cas.cz](mailto:hejdova@icpf.cas.cz)

Zplyňování biomasy a dalších alternativních paliv představuje perspektivní trend v produkci tepla a elektrické energie. Získaný plyn obsahuje kromě žádoucích složek (CO, H<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>) také celou řadu nečistot, mezi nimi zejména prach a dehet, které musí být před dalším použitím z plynu odstraněny. Stanovení dehtu je důležitou součástí hodnocení kvality plynu a účinnosti procesů čištění.

V současné době se používá několik metod pro stanovení obsahu dehtu v plynu. Tyto metody jsou založené na odběru známého množství plynu a absorpci<sup>1</sup> nebo adsorpci<sup>2</sup> přítomného dehtu. Zachycený dehet se následně analyzuje gravimetricky nebo pomocí plynové chromatografie. Nevýhodou těchto metod je dlouhá časová prodleva mezi odběrem plynu a získáním výsledků způsobená nutností laboratorního zpracování vzorků. V systémech, kde je produkován plyn přímo veden k dalšímu využití, a nebo je sledována účinnost čisticího procesu v závislosti na podmínkách jeho provozu, je nutná okamžitá kontrola kvality plynu (stanovení obsahu dehtu). Proto byl na VŠCHT Praha navržen on-line analyzátor dehtů, který je představen v této práci.

Navržený on-line analyzátor pracuje na principu rychlé chromatografické separace na krátké chromatografické

koloně za nízkých teplot. Permanentní plyny a lehčí uhlovodíky nejsou na koloně zachycovány a prochází přímo na detektor, zatímco zachycené dehty se uvolňují až při zpětném proplachu prudkým zvýšením teploty chromatografické kolony. Obě skupiny látek jsou zaznamenávány na jednom plameno-ionizačním detektoru. Navrženou metodou lze stanovit dehet o definovaném složení v koncentracích vyšších než 5 mg.m<sup>-3</sup>.

*Tato práce byla podpořena Grantovou agenturou České republiky (projekt č. GA104/07/0977) a Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (projekt č. MSM 6046137304).*

- [1] Neeft JPA, Knoef HAM, Zielke U, Sjöström K, Hasler P, Simell PA, et al. *Guideline for sampling and analysis of tar and particles in biomass producer gases*, Energy project ERK6-CT1999-2002.
- [2] Brage C, Yu Q, Chen G, Sjöström K. *Use of amino phase adsorbent for biomass tar sampling and separation*, *Fuel* 1997;76:137-142.

#### 6Po-Po7

### SIMS INVESTIGATION OF NICKEL SILICIDE CONTACT LAYERS

A. VINCZE<sup>1</sup>, A. ŠATKA<sup>2</sup>, R. SRNÁNEK<sup>3</sup>, D. DONOVAL<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, Bratislava

<sup>2</sup>FEI STU Bratislava, Katedra mikroelektroniky

<sup>3</sup>Department of Microelectronics, Slovak University of Technology, Faculty of Electronic Engineering and Information Technology, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, Slovakia

Korešpondenční autor: [vincze@ilc.sk](mailto:vincze@ilc.sk)

Low-resistance Nickel Silicide (NiSi) based ohmic contacts are intensively used for industrial and automotive device applications. Due to its low resistivity comparable to TiSi<sub>2</sub>, superior morphological stability and low film/silicon stress, NiSi is examined as a suitable silicide for ULSI ICs and Si nanostructures [1]. The formation of NiSi includes Si surface pretreatment, Ni deposition, and subsequent NiSi transformation during the heat-treatment.

Si (111) wafers with p-n junction formed by diffusion were used in this study. After the diffusion the surfaces were chemically cleaned to remove oxides and residuals from the diffusion process. Standard Ni plating solution was used for electroless plating of Si [2]. Ni silicide was formed by furnace annealing performed at 630 °C for 30 min in a forming gas. The Ni contacts were finalized by plating of Ni+P and thin Au layers.

Time of flight secondary ion mass spectrometry (TOF SIMS), SEM/EDS and micro-Raman scattering spec-

troscopy (RSS) methods were used for structure and material characterization.

The TOF-SIMS depth profiles confirm formation of the 500 ÷ 600 nm thick NiSi layer containing NiO<sub>x</sub> and PO<sub>x</sub> oxides at the surface formed during the sintering process. Concentration of the P inserted from the reducing agent peaks at the silicide surface and practically follows the unreacted Ni during the silicide formation. Relatively unsharp decrease in Ni, NiSi and P signals corresponds to the inhomogeneous milling process of rough NiSi layer/interface. Phase transformation of Ni to NiSi has been confirmed from the micro RSS spectra with main peaks at 196 and 212 cm<sup>-1</sup> [3].

#### Acknowledgement

The authors would like to thank M. Predmerský and R. Záluský for technical assistance. This work was partially supported by grants AV 4/0022/05, APVV-20-055405 and 1/3076/06.

- [1] Y. Wu et al.: Nature 430, 61, 2004.
- [2] S. Furukawa et al.: Sensors and Actuators A56, 261, 1996.
- [3] F. F. Zhao et al.: Microelectronic Engineering B21, 862, 2003.

#### 6Po-Po8

### MĚŘENÍ POVRCHU PALLADIOVÝCH NOSIČOVÝCH KATALYZÁTORŮ CHEMISORPČNÍ TECHNIKOU

J. PATERA<sup>1</sup>, J. KRUPKA<sup>2</sup>, J. PAŠEK<sup>2</sup>

<sup>1</sup>VŠCHT Praha

<sup>2</sup>Vysoká škola chemicko-technologická Praha

Korešpondenční autor: jan.patera@vscht.cz

Měření velikosti částic kovové aktivní složky na katalyzátorovém nosiči vyjádřené její disperzitou popř. velikostí specifického povrchu je nezbytné jak pro základní studie o chování katalyzátoru tak pro průmyslové aplikace. Chemisorpce vhodných molekul je nejrozšířenější užívanou technikou díky její vlastní jednoduchosti a nenáročnosti z hlediska provozních nákladů. Principem této metody je silná jednovrstvá adsorpce vybraného adsorptivu, který se selektivně váže na povrch aktivní složky katalyzátoru. Mezi běžně používané adsorptivy patří vodík, kyslík, oxid dusný, oxid uhelnatý, sirovodík nebo sirouhlík. Byla vyvinuta metodika měření chemisorpce oxidu uhelnatého V práci byl studován vliv opracování katalyzátoru před vlastním měřením redukcí vodíkem s jeho následnou desorpceí z povrchu i objemu palladia. Za daných podmínek byl studován vliv teploty a doby trvání jednotlivých kroků měření na reprodukovatelnost výsledků. Dále byla sledována možnost užití

této techniky na použité katalyzátory z hydrogenačních reakcí. Výsledky měření byly porovnávány s dostupnými údaji komerčních výrobců katalyzátorů a s výsledky z jiných charakterizačních metod.

#### 6Po-Po9

### PROJEKT NANOMEMPRO

Z. CÍLOVÁ<sup>1</sup>, V. FÍLA<sup>2</sup>, B. BERNAUER<sup>2</sup>, M. LHOTKA<sup>3</sup>

<sup>1</sup>VŠCHT Praha

<sup>2</sup>Ústav anorganické technologie, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6

<sup>3</sup>Vysoká škola chemicko-technologická Praha

Korešpondenční autor: cilovaz@vscht.cz

NanoMemPro (The European Network of Excellence on Nanoscale-based Membrane Technologies) je čtyřletý projekt, který vznikl v rámci třetí tématické priority 6. RP EU (Nanotechnologie a nanovědy, multifunkční materiály a nové výrobní procesy a nástroje). V projektu je sdruženo 13 významných institucí z různých evropských zemí, působících v oblasti membránových technologií.

Náplní projektu je prohloubení vzájemných vazeb mezi akademickými institucemi, výzkumnými organizacemi a průmyslovými partnery. Cílem tohoto projektu je zefektivnění spolupráce všech vědeckých pracovišť zabývajících se vývojem a výzkumem membrán a membránových technologií. Toto by se mělo projevit zejména ve sdílení technického vybavení, v integraci vzdělávacích programů a vědecké činnosti. Klíčovým úkolem tohoto projektu je vytvoření nového subjektu mezinárodní neziskové organizace „European Membrane House“, která by zastřešovala výše zmíněné činnosti a tím i podporovala vývoj membránových technologií a jejich aplikaci v průmyslovém měřítku.

Tato práce vznikla s finanční podporou projektu NMP3-CT-2004-500623.

#### 6Po-Po10

### ÚPRAVA SLOŽENÍ PLYNU ZE ZPLYŇOVÁNÍ BIOMASY A ODPADNÍCH PLASTŮ

M. VOSECKÝ<sup>1</sup>, M. POHOŘELÝ<sup>1</sup>, P. KAMENÍKOVÁ<sup>1</sup>, S. SKOBLJA<sup>2</sup>, M. PUNČOCHÁŘ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ÚCHP AV ČR, v.v.i.

<sup>2</sup>Ústav plynárenství, koksochemie a ochrany ovzduší, VŠCHT Praha

Korešpondenční autor: vosecky@icpf.cas.cz

Generátorový plyn ze zplyňování biomasy a odpadních plastů vzduchem je složen z mnoha složek. Mimo hlavních plynných složek, mezi které patří H<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> a N<sub>2</sub>, plyn též obsahuje vedlejší složky jako

sírné a dusíkaté látky, alkálie, prach a v neposlední řadě dehet. Protože by tyto složky způsobovaly technologické obtíže při využívání vzniklého plynu, je třeba je před jeho použitím odstranit. Klíčovou nežádoucí složkou je v případě zplyňování biomasy především dehet, který může kondenzovat, tvořit aerosoly či polymerovat v potrubním systému nebo následných technologiích.

Dehet může být z plynu odstraněn, resp. jeho tvorba potlačena přímo ve zplyňovacím generátoru, což nazýváme primárním opatřením pro odstranění dehtu. Druhou možností je odstranění dehtu v samostatném zařízení za zplyňovacím generátorem, přičemž hovoříme o sekundárních opatřeních. Hlavní předností primárních opatření oproti sekundárním je především zjednodušení celé technologie využití plynu, neboť není potřeba využívat samostatných technologických celků pro odstraňování dehtu.

Prezentovaná práce je věnována studiu aktivity vybraných materiálů aktivních při reformingových reakcích rozkládajících dehet, které mohou být použity jako materiály potlačující tvorbu dehtu přímo ve fluidní vrstvě. Těmito aktivními materiály jsou olivín, dolomit, jejichž aktivita je porovnávána s křemenným pískem.

*Autoři děkují za finanční podporu Ministerstvu průmyslu a obchodu ČR, projekt číslo 2A—2TP1/024.*

## Pozvané přednášky

### COORDINATION AND CATALYTIC BEHAVIOUR OF FERROCENE ALKENYLPHOSPHINES

P. ŠTĚPNIČKA

*Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra anorganické chemie*

Korešpondenční autor: [stepnic@natur.cuni.cz](mailto:stepnic@natur.cuni.cz)

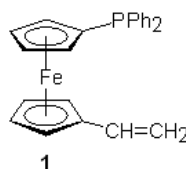
Functionalised ferrocene phosphines have received considerable research attention owing to their successful applications in catalysis. Their chemistry, however, is still dominated by compounds that combine the “standard” donor groups (i.e., ligands of the PP, PN, and PO types) [1] while compounds bearing an additional *soft* donor group are still largely unexplored.

We have recently reported the preparation and coordination behaviour of 1-(diphenylphosphino)-1'-vinylferrocene (**1**) [2], showing the ligand to coordinate predominantly as a simple phosphine. Later, we have studied also the planarly chiral analogue (*S<sub>p</sub>*)-1-(diphenylphosphino)-2-vinylferrocene (**2**) and the related compounds substituted at the vinyl group (e.g., **3** and **4**) [3]. These phosphinoalkenes have been probed as ligands in palladium(II) and tungsten(0)-carbonyl complexes.

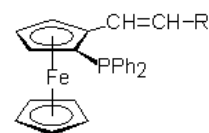
This contribution will summarise the results obtained during our coordination, structural, and electrochemical studies and will also give preliminary results of catalytic testing of the chiral ligands in enantioselective allylic alkylation.

*This work was financially supported by the Grant Agency of Czech Republic (grant no. 203/05/0276) and is a part of the long-term research project supported by the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (project no. MSM0021620857).*

- [1] a) Ferrocenes Homogeneous Catalysis, Organic Synthesis, Materials Science, Togni, A. and Hayashi, T. (Eds.), VCH, Weinheim, Germany, 1995. (b) Togni A. New Chiral Ferrocenyl Ligands for Asymmetric Catalysis in Metallocenes Synthesis, Reactivity, Applications, Togni, A. and Halterman, R. L. (Eds.), vol. 2, ch. 11, pp. 685-721, Wiley-VCH, Weinheim, Germany, 1998. (c) Atkinson, R. C. J.; Gibson, V. C.; Long, N. J. Chem. Soc. Rev. 2004, 33, 313.
- [2] P. Štěpnička, I. Císařová, Collect. Czech. Chem. Commun. 2006, 71, 215.
- [3] P. Štěpnička, I. Císařová, Inorg. Chem. 2006, 45, 8785.



**1**



**2** R = H

**3** R = (*E*)- and (*Z*)-Me

**4** R = Ph

### ÚLOHA POLYNEASÝTENÝCH MASTNÝCH KYSELÍN V PREVENCI NIEKTORÝCH CIVILIZAČNÝCH OCHORENÍ

J. ŠAJBIDOR

*Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav biotechnológie a potravinárstva*

Korešpondenční autor: [jan.sajbidor@stuba.sk](mailto:jan.sajbidor@stuba.sk)

Lipidové mediátory zohrávajú kľúčovú úlohu pri riadení fyziologických procesov na bunkovej aj orgánovej úrovni. Je známe, že kyselina arachidónová je prekursorom biologicky mimoriadne účinných prostaglandínov

a leukotriénov. Bunky cicavcov obsahujú niekoľko typov oxygenáz, ktoré inkorporujú regio- a stereošpecifické chemické signály do molekúl mastných kyselín. Signály tohto typu, využívajú bunky na vnútro a medzi bunkový prenos príslušných fyziologicky významných informácií. Aj keď je enzymológia oxidatívneho metabolizmu kyseliny arachidónovej z väčšej časti spoločná pre všetky mastné kyseliny, ktoré obsahujú 1,4-pentadiénový systém, kyselina arachidónová je predsa výnimočná v tom, že je *in vivo* estericky viazaná na zásoby lipidov, z ktorých sa selektívne uvoľňuje po indukcii hormónom. Transmembránové signály vedú k aktivácii špecifických lipáz, následne dochádza k odštiepeniu kyseliny arachidónovej a k jej oxidácii na množstvo fyziologicky významných metabolitov známych pod spoločným označením "eikozanoidy".

V dráhe biosyntézy oxidovaných eikozanoidov - prostaglandínov existuje niekoľko miest v ktorých možno zasiahnuť do ich biosyntézy. Prvým miestom sú fosfolipázy, ktoré zodpovedajú za prísun kyseliny arachidónovej pre cyklooxygenázu. Známymi inhibítormi fosfolipáz sú kortikosteroidy, ktoré našli použitie v terapii artritídy, alebo všeobecne reumatoidných zápalov. Ďalšou možnosťou je inhibícia na úrovni cyklooxygenázy (COX), ktorá je kľúčovým enzýmom biosyntézy prostanoidov. V roku 1971 John Vane so spolupracovníkmi ukázali, že COX ireverzibilne inhibuje kyselina acetylsalicylová (aspirín, ASP). Tento objav objasnil mechanizmus účinku ASP, ktorý sa pri terapii zápalových procesov používal od konca 19. storočia. Aplikácia ASP pri terapii ischemickej choroby srdca, anginy pectoris a pri prevencii infarktu myokardu je založená na tom, že efektívnejšie inhibuje PGHS trombocytov (v ktorých sa tvorí z AA silne proagregačný TXA<sub>2</sub>) ako PGHS endotelialných buniek ciev (tu sa AA prednostne transformuje na antiagregačný PGI<sub>2</sub>). Okrem hľadania účinných inhibítorov, ktoré našli uplatnenie v prevencii i terapii niektorých ochorení, sa v humánnej medicíne používajú aj samotné prostanoidy. Ide hlavne o PGE<sub>1</sub> (liečba žalúdočných vredov, liečba nekróz a terapia porúch erekcie), PGF<sub>2</sub>α (indukcia pôrodu, liečba pooperačných črevných obštrukcií), PGE<sub>2</sub> (vyvolanie pôrodu, zvýšenie kontrakcií matrice) a prostacyklín (liečba periférnych cirkulačných ochorení, predinfarktové stavy, mozgové cievne príhody). Terapeutický potenciál ostatných prostanoidov je predmetom intenzívneho výskumu.

Pracovníci Oddelenia biochemickej technológie FCHPT sa intenzívne venujú biotechnologickej produkcii niektorých eikozanoidov. Vypracovali alebo modifikovali metódy kvantitatívnej a kvalitatívnej analýzy PGs a PG podobných látok a publikovali účinnú metódu purifikácie AA mikrobiálneho pôvodu, tak aby sa dala použiť ako prekursor pri biotransformáciách na eikozanoidy. Významným zistením je schopnosť niektorých rastlín konvertovať exogénnu kyselinu arachidónovú na biologicky aktívne hydroxyeikozanoidy.

## Prednášky – sekcia 1

### MOLEKULÁRNÍ SIMULACE A JEJICH ULOHA V CHEMII

I. NEZBEDA

*Prirodovedecka fakulta, UJEP a Termodynamická laborator E. Haly, AV CR*

Korešpondenčný autor: *IvoNez@icpf.cas.cz*

Molekulární simulace představují dnes v řadě oblastí chemie a chemického inženýrství rutinní experimentální nástroj. Od jednoduchých simulací na modelových systémech pro potřeby molekulární fyziky se počítačové simulace dostaly do stadia umožňující studovat složité procesy a získávat i data, která jsou jinak experimentálně nedostupná.

Teoretická skupina v Halově termodynamické laboratoři ÚChP AVČR se zabývá již od začátku 70. let minulého století (jako vůbec první v celé tehdejší východní Evropě) metodologií molekulárních simulací a jejich aplikacemi, od problémů kvantové chemie (interakční Hamiltoniány), přes chemické inženýrství (fázové rovnováhy a rovnováhy v systémech s chemickou reakcí) až po materiálový výzkum (membrány, nanosystémy).

V přednášce budou stručně nastíněny principy molekulárních simulací, shrnut současný stav a problémy (metodologické i technické) a očekávaný vývoj, a konkrétně pak bude uvedena řada výsledků z různých aplikací v chemii.

### TERMODYNAMICKÉ OBMEDZENIA PRI INTERPRETÁCII MERANÍ A VÝPOČTOV JEDNOTLIVÝCH MOLEKÚL (BIO)POLYMÉROV

T. BLEHA, P. CIFRA

*Ústav polymérov, Slovenská Akadémia Vied, Dúbravská cesta, SK-84236 Bratislava, Slovenská republika*

Korešpondenčný autor: *bleha@savba.sk*

V poslednej dekáde sme svedkami obrovského pokroku v technikách mikromanipulácie jednotlivých (single) makromolekúl v celom spektre od syntetických polymérov po biopolyméry ako DNA či bielkoviny. Mikroskopia na báze atómových síl (AFM), optické či magnetické pinzety a podobné metódy sa stávajú rutinnými technikami nanovedy a nanotechnológií. V prípade makromolekúl, okrem zobrazovania na molekulovej škále, tieto metódy prinášajú unikátnu možnosť na testovanie rôznych modelov polymérnych reťazcov. Prvýkrát tak možno existujúce teórie a molekulové simulácie, týkajúce sa napr. internej mechaniky a elasticity jednotlivých reťazcov, či interakcií segmentov a stability makromolekúl, porovnať s experimentálnymi výsledkami.



Mechanické vlastnosti jednotlivých reťazcov do značnej miery rozhodujú o praktickom využití polymérnych materiálov a sú tiež fundamentálnym aspektom biologických funkcií bielkovín, nukleových kyselín a polysacharidov. Na druhej strane však termodynamická interpretácia meraní s jednotlivými (single) makromolekulami predstavuje problém, keďže podmienka veľkého počtu jednotiek v štatisticko-termodynamickom ensembli nie je splnená. Veľkú úlohu tak v experimente zohrávajú fluktuácie a voľba okrajových podmienok. Podrobne sa táto otázka skúmala predovšetkým v prípade naťahovania jednotlivých makromolekúl. Početné merania [1] ako i naše výpočty a simulácie [2,3] ukázali, že krivky sila - predĺženie majú naprosto rozdielny priebeh podľa toho, či naťahovanie prebieha za podmienky konštantnej sily alebo konštantnej dĺžky. V prezentácii podrobne popíšeme tieto rozdiely pre ohybné a tuhé makromolekuly ako aj ich odlišnosť od priemerných funkcií sila-predĺženie stanovených pre makroskopicky veľké systémy.

*Táto práca bola čiastočne podporená VEGA grantami č. 2/6014/26 a 2/6116/26.*

- [1] A. Janshoff, M. Neitzert, Y. Oberdörfer, H. Fuchs, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 39, 3212 (2000)
- [2] M. Zemanová, T. Bleha, *Macromol. Theory Simul.*, 14, 596 (2005)
- [3] P. Cifra, T. Bleha, *Polymer* 48, 2444 (2007)

#### EVALUATION OF THE EFFICACY OF TWO DERIVATISATION AGENTS IN PYROLYSIS-GC/MS ANALYSIS OF ALKYD CAR PAINTS FOR FORENSIC PURPOSES

J.M. MILCZAREK<sup>1</sup>, J. ZIĘBA-PALUS<sup>2</sup>, P. KOŚCIELNIAK<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Jagiellonian University, Department of Analytical Chemistry, Laboratory for Forensic Research

<sup>2</sup>Institute of Forensic Research, ul. Westerplatte 9, 31-033 Kraków

<sup>3</sup>Jagiellonian University, Department of Analytical Chemistry, ul. R. Ingardena 3, 30-060 Kraków, Institute of Forensic Research, ul. Westerplatte 9, 31-033 Kraków

Korešpondenčný autor: jakub@milczarek.eu

Car paint as physical evidence is probably one of the samples most commonly examined in forensic laboratories. Chips of paint coat or paint smears are very often transferred to the clothing of a hit-and-run victim on impact with an automobile or as a consequence of other road accidents.

Polymer binders of new automobile paints are mostly acrylic (modified with styrene, melamine or urethane) or alkyd (modified or not with melamine).

For the identification and comparison purposes of the acrylic paints Py-GC/MS analysis without derivatisation are usually performed. In the case of alkyd resins simultaneous pyrolysis and methylation with tetramethylammonium hydroxide (TMAH) or butylation with tetrabutylammoniumhydroxide (TBAH) should be applied.

Derivatisation increases the number and the quantity of the pyrolysis products. The observed compounds are different than in the standard pyrolysis analysis - carboxylic acids and alcohols could be absent in traditional pyrolysis, whereas during pyrolysis with derivatisation - methylesters or butylesters could be detected.

For the Py-GC/MS analysis TurboMass Gold (PerkinElmer) and CDS Pyroprobe 2000 (Analytix, UK) were applied. The GC program was: 40°C maintained for 2.5 min; increased 10.5°C·min<sup>-1</sup> to 320°C, 320°C maintained for 5 min. A RTx-35MS capillary column was used.

Each sample was analysed three times at 750°C without derivatisation and three times at 400°C and 750°C with derivatisation with 10% TMAH or 10% TBAH.

Advantages and disadvantages of the application of both, TMAH and TBAH used as reagent in the pyrolysis of alkyd car paints in comparison to standard Py-GC/MS will be presented.

*The research was financially supported by the State Committee for Scientific Research, Poland, within the project No. 0 T00C 013 26.*

#### CHARACTERISATION OF HOLLOW GELULAR BEADS AND MOLECULAR IMPRINTED POLYMERS BY MEANS OF DIFFERENT ANALYTICAL METHODS

M.M. ZAITZ<sup>1</sup>, E. WITEK<sup>1</sup>, E. BORTEL<sup>1</sup>, A. TELK<sup>2</sup>, J.M. MILCZAREK<sup>3</sup>, B. DUDEK<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Jagiellonian University, Faculty of Chemistry, Department of Chemical Technology

<sup>2</sup>Jagiellonian University, Faculty of Chemistry, Department of Analytical Chemistry

<sup>3</sup>Jagiellonian University, Department of Analytical Chemistry, Laboratory for Forensic Research

Korešpondenčný autor: malgorzata@zaitz.eu

Polymer chemistry and chemistry of polymer materials are groups of science which nowadays are developing most rapidly. Chemistry is the kind of science which is divided in to various sections but when there is a need to make some more complex studies it is necessary to work together to gain better results. In our case polymer chemistry group is working with several different analytical groups.

Molecularly imprinted polymers are the materials that can be used in some specific analytical applications. In our

research we deal with copolymers of styrene and divinylbenzene and with copolymers with third monomer which plays a role of template. Copolymers obtained by suspension polymerization were designed and tested in determination of copper concentration in water by Solid Phase Extraction (SPE) coupled to Atomic Absorption Spectrometry (AAS). Obtained materials were characterised with BET method and Pyrolysis Gas Chromatography/Mass Spectrometry (Py-GC/MS) to verify structure of polymers. Examination under the optical microscope was also performed.

As a template complex of modified salen with copper was used. Several variations of polymers' composition were made. Ratio of styrene to divinylbenzene was varied from 7%:93% up to 50%:50%. Second parameter which was optimised was ratio of template to sum of the other monomers. This parameter was varied from 1:40 (salen to sum of monomers mol:mol) up to 1:300.

Modifications of template were also considered but due to the problems with solubility of functional monomers it was hard to find the other alternatives.

- [1] David C. Sherrington; Chem Commun.; 2275-2286; 1998
- [2] Peter A.G. Cormack\*, Amaia Zurutuza Elorza; Journal of Chromatography B; 804; 173-182; 2004

## VYUŽITÍ ELEKTROD Z PASTOVÝCH AMALGÁMŮ VE VOLTAMETRII

B. YOSYPCHUK

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

Korešpondenčný autor: josypcuk@jh-inst.cas.cz

Kapalné a pevné amalgámy se osvědčily jako vhodný materiál pro přípravu elektrod ve voltametrii a v jiných metodách odvozených od polarografie. Pevné amalgámy [1 -3] získávané amalgamací jemného prášku příslušného kovu (MeSAE - metal solid amalgam electrode; kde Me - Ag, Au, Ir, Cu, Bi, Cd aj. ) představují čistší obdobu zcela netoxických zubních amalgámů. Některé MeSAE mají jen o málo menší přepětí vodíku, než klasická visící rtuťová kapková elektroda, a tedy dovolují většinu měření proveditelných jen na rtuťových elektrodách.

Existuje také poměrně úzký rozsah obsahu kovu ve rtuti, kdy tato směs má dlouhodobě konzistenci pasty. Pastové stříbrné amalgámy s obsahem Ag 15 - 18 % tuhnu relativně rychle (1 - 2 dny) a jsou prakticky nepoužitelné pro pastové elektrody. Je-li obsah stříbra menší než 10 %, amalgám je spíše kapalný než pastový (netvaruje se, tvoří se meniskus). Podle našich experimentů optimální podíl Ag v pastě je 11 - 12 %. Tato směs se důkladně promísí

v zařízení pro přípravu dentálních amalgámů a získaným pastovým amalgámem se naplní tělo elektrody, která se používá jako klasická pastová elektroda s uhlíkovou pastou. Před použitím této pracovní elektrody (WE) se vytlačí zhruba 1 mm pasty, seškrábne se, znovu se pasta trochu vytlačí a povrch se zarovná na skleněné destičce. Se správně připravenou elektrodou lze pracovat i několik dnů bez výměny jejího aktivního povrchu (regenerace WE se provádí elektrochemicky před každým měřením). Takováto elektroda by mohla spojit přednosti kovových a pastových elektrod. Elektroda z pastového amalgámu byla vyzkoušena různými metodami pomocí běžně používaných testovacích látek (jodičnany, p-nitrofenol, Cd<sup>2+</sup>, Pb<sup>2+</sup> aj.).

Tato práce vznikla s podporou grantu GA ČR č. 203/07/1195.

- [1] Yosypchuk B., Novotný L., Crit. Rev. Anal. Chem. 2002, 32, 141.
- [2] Yosypchuk B., Novotný L., Electroanalysis 2003, 15, 121.
- [3] Yosypchuk B., Fojta M., Havran L., Heyrovský M., Paleček E., Electroanalysis, 2006, 18, 186.

## Prednášky – sekcia 2

### NESTEROIDNÉ MEĎNATÉ ANTIFLOGISTIKÁ

M. MELNÍK

STU, FCHPT Oddelenie anorganickej chémie

Korešpondenčný autor: milan.melnik@stuba.sk

Reumatizmus z pohľadu ochorenia sa radí na jedno z popredných miest v ľudskej populácii. Táto skutočnosť je významnou hybnou silou hľadania nových preparátov s výborným antireumatickým pôsobením. Rad doteraz známych a využívaných preparátov pri terapii tohto ochorenia je steroidného charakteru, s výraznými vedľajšími účinkami. Eliminácia vedľajších pôsobení, je cestou hľadania nových účinných preparátov nesteroidného charakteru. Takými môžu byť mednaté antiflogistiká. A práve týmto preparátom je venovaná naša pozornosť.

Práca vznikla s podporou grantov VEGA č. 1/2452/05, č. 1/2452, APVT-20-005504

## SYNTHESIS, SPECTRAL AND MAGNETIC PROPERTIES AND CRYSTAL STRUCTURES OF COPPER(II) COMPLEXES WITH HETEROCYCLIC ACIDS

P. SEGLA<sup>1</sup>, D. MIKLOŠ<sup>2</sup>, J. MONCOL<sup>3</sup>, J. ŠVOREC<sup>2</sup>, V. KUCHANTANIN<sup>2</sup>, J. LAZORÍK<sup>2</sup>, M. MELNÍK<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Fakulta chemickej a potravinárskej chémie STU Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava

<sup>2</sup>FCHPT STU Bratislava

<sup>3</sup>Slovenská Technická Univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov

<sup>4</sup>STU, FCHPT Oddelenie anorganickej chémie

Korešpondenčný autor: peter.segla@stuba.sk

Copper(II) carboxylates are very interesting compounds with pharmacological activities. These compounds can have anti-inflammatory, anti-arthritic, anti-cancer, anti-diabetic, antimutagenic, antimicrobial or cytogenic effects [1]. Synthesis, spectral and magnetic properties and crystal structures of copper(II) complexes with isonicotinic acid, nicotinic acid and their derivatives have already been reported [2].

In this paper, synthesis, spectral properties and crystal structures of copper(II) dimeric acetate type complexes with 2-tiophenecarboxylic acid (2-TPCH), 5-methyl-2-tiophenecarboxylic acid (5-Me-2-TPCH), 2-furancarboxylic acid (2-FUCH) or 5-bromo-2-furancarboxylic acid (5-Br-2-FUCH) are reported. For the complex  $\{2[\text{Cu}_2(5\text{-Me-2-TPC})_4(\text{H}_2\text{O})_2]\}_2 \cdot 0.976[(5\text{-Me-2-TPCH} \cdot \text{H}_2\text{O})_2] \cdot 0.024[\text{Cu}(5\text{-Me-2-TPC})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  (Fig. 1) structure has been determined by X-ray structure analysis. The complex crystallizes in the triclinic system, space group P-1. Symmetry independent part of the structure of the complex is formed by two dimeric units of  $\text{Cu}_2(5\text{-Me-2-TPC})_4(\text{H}_2\text{O})_2$ , one separate molecule of 2-TPCH and one free water molecule. Substitution disorder or "impurity" in the form of a statistically occurring complex unit  $[\text{Cu}(5\text{-Me-2-TPC})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  has been detected directly in the structure with the Cu central atom located at the symmetry center between the free water molecules. The occupancy factor for the "impurity" refined to 0.024(2). The whole structure could be refined to the conventional R-factor  $R_1 = 0.0296$ . The presence of the "impurity" has been confirmed also by EPR and IR spectra of the above complex.

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

[1] J. R. J. Sorenson, Metal Ions in Biological Systems, H. Siger, Ed., Marcel Dekker, New York, 1982, vol. 14, pp. 77 - 113.

[2] J. Moncol, M. Korabik, P. Segla, M. Koman, D. Mikloš, J. Jašková, T. Glowiak†, M. Melník, J.

Mrozinski, M. R. Sundberg: Z. Anorg. Allg. Chem., 633 (2007), 298 and references cited therein.

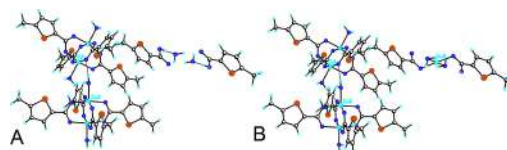


Figure 1 Molecular structure of complex  $\{2[\text{Cu}_2(5\text{-Me-2-TPC})_4(\text{H}_2\text{O})_2]\}_2 \cdot 0.976[(5\text{-Me-2-TPCH} \cdot \text{H}_2\text{O})_2] \cdot 0.024[\text{Cu}(5\text{-Me-2-TPC})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  showing the two components of the disorder; A - with  $(5\text{-Me-2-TPCH} \cdot \text{H}_2\text{O})_2$ ; B - with  $[\text{Cu}(5\text{-Me-2-TPC})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$

## NOVÉ METALOFENAMÁTY A ICH BIOLOGICKÉ ÚČINKY

D. HUDECOVÁ<sup>1</sup>, L. KRUPKOVÁ<sup>2</sup>, Š. LORINZ<sup>3</sup>, M. MELNÍK<sup>3</sup>

<sup>1</sup>FChPT STU, Ústav biochémie, výživy a ochrany zdravia, Oddelenie biochémie a mikrobiológie

<sup>2</sup>STU, FCHPT Oddelenie Biochémie a Mikrobiológie

<sup>3</sup>STU, FCHPT Oddelenie anorganickej chémie

Korešpondenčný autor: daniela.hudecova@stuba.sk

Koordináčnym zlúčeninám s atómom kovu v molekule je permanentne venovaná pozornosť v rôznych oblastiach chémie, biológie a farmakológie, najmä vďaka väzbovým možnostiam, ktoré vedú k výraznej štruktúrnej variabilite, ovplyvňujúcej chemické a biologické vlastnosti zlúčenín. Vznikom metalokomplexu sú často vytvorené podmienky pre transport farmakofora v organizme, zníži sa toxicita iónu kovu a obyčajne sa zvyšuje biologická aktivita metalokomplexu. S cieľom rozšíriť poznatky o biologickej aktivite fenamátov, predstavujúcich druhú generáciu nesteroidných antiflogistík, boli pripravené nové metalofenamátové komplexy všeobecného vzorca  $\text{MX}_2$ , M = kovový ión ( $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$ ,  $\text{Co}^{2+}$ ), X = anión kyseliny niflumovej, flufenamovej, mefánovej, tolfemovej, meclofenovej. Ťažisko práce bolo sústredené na stanovenie a charakterizovanie antimikróbnej aktivity pomocou hodnôt  $\text{IC}_{50}$  a MIC na baktériách, kvasinkách a mycéliových hubách. Pri vybraných zlúčeninách sme stanovili ich potenciálnu mutagénnu aktivitu (Amesov test), antioxidačnú (TEAC, FRAP metóda) a protizápalovú aktivitu (inhibícia aktivity lipoxygenázy) a účinok na permeabilitu biologických membrán. Zavedenie iónov  $\text{Zn}^{2+}$  a  $\text{Co}^{2+}$  do molekuly fenamátov vo väčšine prípadov prehĺbilo inhibičný účinok komplexov na mikroorganizmy a zároveň potencovalo poškodenie biologických membrán sprevádzané efluxom antokyanov z *Beta vulgaris* var. *rubra*, hemoglobínu z ľudských erytrocytov a proteínov z buniek *Candida albicans*. Zlúčeniny s najvyššou antimikróbnou aktivitou

Co(tolf)<sub>2</sub>.H<sub>2</sub>O a Co(fluf)<sub>2</sub> (H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub> nemajú mutagénnu aktivitu. Metalofenamáty disponujú slabou antioxidačnou aktivitou. Prítomnosť med'natých iónov v molekule fenamátov výrazne prehĺbila inhibíciu aktivity enzýmu lipoxygénázy.

Práca vznikla s podporou grantov VEGA č. 1/325/06, č. 1/2452, APVT-20-005504

### A BRIDGING ABILITY OF N,N-DIETHYLNICOTINAMIDE LIGAND IN CARBOXYLATO COPPER(II) COMPLEXES.

J. MONCOL<sup>1</sup>, J. KAVALIROVÁ<sup>1</sup>, Z. REPICKA<sup>1</sup>, L. MARTIŠKA<sup>1</sup>, D. MIKLOŠ<sup>2</sup>, D. VALIGURA<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Slovenská Technická Univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov

<sup>2</sup>FCHPT STU Bratislava

Korešpondenčný autor: jan.moncol@stuba.sk

N,N-diethylnicotinamide (DENA) is known in copper(II) complexes as terminal ligand for long time and only two chlorocopper(II) complexes with bridging DENA ligand have been known [1,2]. New polymeric carboxylatocopper(II) complexes with bridging DENA ligand have been prepared, their structures have been determined by X-ray analysis, and their spectral and magnetic properties have been studied. Two different types of structure were found. The structure of complexes [Cu<sub>2</sub>(RCO<sub>2</sub>)<sub>4</sub>(DENA)]<sub>n</sub> (RCO<sub>2</sub><sup>-</sup> = chloroacetate or 2-nitrobenzoate) consist of zigzag polymeric chains containing Cu<sub>2</sub>(RCOO)<sub>4</sub> dimeric units joined by DENA bridges. The structure of complexes [Cu(RCO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(DENA)(H<sub>2</sub>O)]<sub>n</sub> (RCO<sub>2</sub><sup>-</sup> = 3-methylsalicylate, 4-methoxysalicylate, 3,5-dichlorosalicylate or 3,5-dibromosalicylate) consist of the Cu(RCOO)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O) units bonded by DENA ligands into spiral chains.

We thank Scientific Grant Agency of the Ministry of Education of Slovak Republic and the Slovak Academy of Sciences for financial support (VEGA 1/4454/07) and Research and Development Support Agency for financial support (APVT-20-005504).

[1] Rubinchik, B.Ya.; Ionov, V.M.; Ribakov, V.B.; Aslanov, L.A., Porai-Koshits, M.A.; Tsintsadze, G.V.: Zh. Strukt. Khim. 1976, 18, 207; Herstein, F.H.; March, R.E.: Acta Cryst. 1998, B54, 677.

[2] Davies, G.; El-toukhy, A.; Onan, K.D.; Vedis, H.: Inorg. Chim. Acta 1985, 98, 85.

### ŠTRUKTÚRA A VLASTNOSTI NITROBENZOÁTOMEĎNATÝCH KOMPLEXOV S NIKOTÍNAMIDOM

Z. VASKOVÁ<sup>1</sup>, P. STACHOVÁ<sup>1</sup>, J. MONCOL<sup>1</sup>, M. KORABÍK<sup>2</sup>, M. MAZÚR<sup>3</sup>, D. VALIGURA<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Slovenská Technická Univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov

<sup>2</sup>University of Warsaw, Faculty of Chemistry, Pasteura 1, 02-093 Warsaw, Poland

<sup>3</sup>Slovenská Technická Univerzita, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav fyzikálnej chémie a chemickej fyziky

Korešpondenčný autor: zuzana.vaskova@stuba.sk

V rámci systematického výskumu benzoátokomplexov medi(II) bola pozornosť venovaná získavaniu poznatkov o príprave a vlastnostiach nitrobenzoátomeďnatých komplexov s niektorými N-donorovými biologicky aktívnymi ligandami. V rámci tohto zamerania bola pripravená séria nových med'natých komplexov so 4-, 3-, 2-nitrobenzoovými aniónmi a 3,5-dinitrobenzoovým aniónom a s neutrálnym ligandom nikotínamidom. Získané látky boli charakterizované elementárnou analýzou, elektrónovou, infračervenou a EPR spektroskopiou a bola im meraná magnetická susceptibilita. Vo väčšine prípadov boli predpokladané štruktúry zlúčenín potvrdené RTG štruktúrnou analýzou. Objavili sa tak odlišné štruktúrne motívy s možnosťou interpretovať magnetické a ostatné vlastnosti. Keďže príprava týchto látok bola zameraná aj na skúmanie súvislosti medzi štruktúrou a ich biologickou aktivitou, boli komplexy testované na antifungálnu, antimikrobiálnu, prípadne ďalšiu aktivitu.

Ďakujeme vedeckej grantovej agentúre za finančnú podporu grantu VEGA 1/2452/05.

### ŠTÚDIUM KARBOXYLÁTOMEĎNATÝCH KOMPLEXOV A ICH ADUKTOV S BENZTIAZOLOVÝM LIGANDOM.

M. PAJTÁŠOVÁ<sup>1</sup>, D. ONDRUŠOVÁ<sup>1</sup>, G. RUDINSKÁ<sup>1</sup>, V. PAVLÍK<sup>1</sup>, V. JORÍK<sup>2</sup>, M. KOMAN<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Fakulta priemyselných technológií TnUAD, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov

<sup>2</sup>Fakulta chemickej a potravinárskej chémie STU Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava

Korešpondenčný autor: pajtasova@fpt.tnuni.sk

Práca sa zaoberá prípravou a štúdiom štruktúrnych a spektrálnych vlastností štyroch tetrakis(m-alkanoáto-O,O')dimeďnatých komplexov a ich aduktov tetrakis(m-alkanoáto-O,O')bis(benzotiazol)dimeďnatých, s dlhým alkyluhl'ovodíkovým reťazcom, s počtom atómov uhlíka v reťazci 12, 14, 16 a 18. Pripravené komplexy boli študované pomocou infračervenej a UV/VIS spektroskopie,

elektrónovej paramagnetickej rezonancie a ich adukty aj rtg difrakčnou práškovou analýzou. Pri koordinácii benziazolu sa polymérne reťazce karboxylátomedených komplexov menia na diskkrétne centrosymetrické diméry. Štiepenie v symetrickej vibrácii COO- skupiny pri benziazolových aduktoch je spôsobené zmenou typu koordinácie karboxylovej skupiny z tridentátneho typu na bidentátny mostíkový typ. Elektrónové spektrá sú typické pre dimérne karboxyláty typu monohydrát octanu medeného. Rozdiel medzi d-d prechodmi a charakteristickým ramenom sa zväčšuje v poradí CuCn < CuCnbt, čo naznačuje, že sa v tomto poradí zväčšuje distordia koordináčného polyédra. Bezvodé karboxylátokomplexy Cu(II) sú teplotne závislé. EPR spektrá boli u aduktov typické pre dimérne komplexy Cu(II), už pri laboratórnej teplote. Výsledky EPR meraní ukázali, že pripravené komplexy so všeobecným vzorcom Cu<sub>2</sub>(RCOO)<sub>4</sub> a ich adukty Cu<sub>2</sub>(RCOO)<sub>4</sub>L<sub>2</sub> sú antiferomagnetické povahy a spinová interakcia medzi nespárenými elektrónmi Cu(II) iónov sa uplatňuje prevažne supervýmennou interakciou cez mostíkové karboxylátové ligandy.

Táto práca vznikla za podpory grantov VEGA 1/3161/06 a KEGA 3/3230/05 MŠ SR.

## Prednášky – sekcia 3

### POLYFLUORALKYLOVANÉ DIDUSÍKATÉ PĚTIČLENNÉ HETEROCYKLY JAKO INTERMEDIÁTY PRO FLUOROVOU CHEMIU

J. KVÍČALA, M. SKALICKÝ, M. RYBÁČKOVÁ, O. KYSILKA, K. ŠIGUT, M. BABUNĚK, M. HOLAN, J. PATEROVÁ, J. POLOMSKÝ

Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav organické chemie, Technická 5, 166 28 Praha 6

Korešpondenčný autor: kvicalaj@vscht.cz

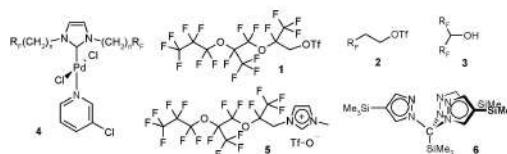
Pětičlenné didusíkaté heterocykly hrají důležitou roli v organické chemii. Zatímco pyrazoly jsou mimo jiné důležitými intermediáty pro ligandy jako jsou škorpionáty nebo tripyrazolymethany, substituované imidazoly mohou být transformovány na iontové kapaliny nebo stálé karbeny (NHC). V posledním desetiletí značně stoupl význam vysoce fluorovaných sloučenin v souvislosti s prudkým rozvojem oblasti označované jako “fluorous chemistry”, využívající nových poznatků o unikátních chemických a separačních vlastnostech těchto látek. Při hledání ligandů nahrazujících dosud převážně používané, avšak málo stálé polyfluorované fosfíny jsme na našem pracovišti syntetizovali několik typů polyfluoralkylovaných cyklopentadienů [1,2]. Zjistili jsme však, že jejich komplexační vlastnosti s rostoucí polyfluoralkylací prudce klesají. Škorpionáty a tripyrazolymethany

jsou poměrně novou skupinou heterocyklických ligandů isoelektronických s cyklopentadienidovými anionty. To stimulovalo náš zájem o polyfluoralkylované pětičlenné heterocykly. S využitím nových fluorovaných stavebních bloků **1-3** na bázi komerčně dostupných perfluoralkyljodidů a perfluoropolyetherů jsme syntetizovali nové typy polyfluoralkylovaných sloučenin: fluorový analog **4** katalyzátoru PEPPSI<sup>TM</sup>, obsahující první dosud známý polyfluoralkylovaný NHC ligand, a fluorovou iontovou kapalinu obsahující perfluoropolyetherový zbytek **5**. Zatímco pyrazoly perfluoralkylované v poloze 3 nebylo možné převést na odpovídající tripyrazolymethany, lithiace klíčového intermediátu, tris(4-jodpyrazolymethanu), a jeho následná silylace poskytla tetrasilylovaný ligand **6**. Analogické pokusy o perfluoralkylace zatím nevedly k cíli.

Děkujeme Grantové agentuře České republiky (Grant č. 203/06/1511) a Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy (projekt KONTAKT č. ME 857) za finanční podporu tohoto projektu

[1] J. Kvíčala; T. Bříza; O. Paleta; J. Čermák, Tetrahedron 2002, 58, 3847.

[2] T. Bříza; M. Havlík; J. Kvíčala; D. Hazafy; M. Kotorá; J. Čermák, nepublikované výsledky.



Nové fluorové stavební bloky a heterocyklické ligandy

### VYUŽITÍ POLARIZOVANÝCH ETHYLENŮ A 4-SUBSTITUOVANÝCH BENZENDIAZONIUM-TETRAFENYLBORÁTŮ PŘI SYNTÉZE HETEROCYKlickÝCH SLOUČENIN

M. SVOBODOVÁ<sup>1</sup>, J. BÁRTA<sup>2</sup>, L. ŠTRUNCOVÁ<sup>1</sup>, P. ŠIMŮNEK<sup>1</sup>, V. BERTOLASI<sup>3</sup>, A. RŮŽIČKA<sup>4</sup>, V. MACHÁČEK<sup>5</sup>, A. LYČKA<sup>6</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Katedra organické chemie

<sup>2</sup>Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, Flemingovo nám. 2, 166 10, Praha 6

<sup>3</sup>Università di Ferrara, Dipartimento di Chimica and Centro di Strutture Diffraattometrica

<sup>4</sup>Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Katedra obecné a anorganické chemie

<sup>5</sup>Univerzita Pardubice

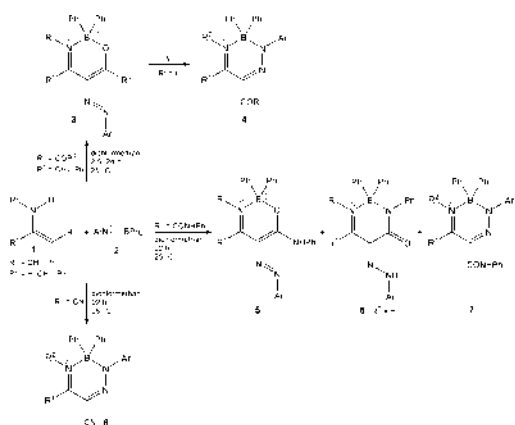
<sup>6</sup>Výzkumný ústav organických syntéz a.s. Pardubice

Korešpondenčný autor: marketa.svobodova@upce.cz

Polarizované ethyleny jsou významnými substráty, které se využívají při syntéze různých heterocyklických sloučenin. Naše předchozí studie ukázaly, že např.  $\beta$ -enaminy reagují se 4-substituovanými benzendiazonium-tetrafluorboráty nebo hexafluorfosfáty za vzniku substituovaných pyridaziniových solí<sup>[1]</sup> a pyrazolů. Použijí-li se do reakce místo výše zmíněných diazoniových solí 4-subst. benzendiazonium-tetrafenylboráty, produkty reakce jsou oxazaboriny **3** (Schéma).<sup>[2]</sup> Některé z nich pak zahřátím přesmykují na triazaboriny **4**. Naproti tomu  $\beta$ -enaminoamidy, další z řady polarizovaných ethylenů, poskytují s diazoniovou solí **2** tři heterocyklické sloučeniny - oxazaboriny **5**, diazaborinony **6** ( $R^2 = H$ ) a v minoritním zastoupení byly izolovány také triazaboriny **7**.<sup>[3]</sup> Reakcí  $\beta$ -enamionitrilů se 4-methylbenzendiazonium-tetrafenylborátem byly získány pouze triazaboriny **8**.<sup>[3]</sup> Struktury připravených sloučenin byly charakterizovány jak v roztoku s využitím multinukleární magnetické rezonance ( $^1H$ ,  $^{13}C$ ,  $^{15}N$  a  $^{11}B$ ), tak i v pevné fázi s pomocí rentgenostrukturní analýzy.

Tato práce vznikla za finanční podpory Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR (Projekt MSM 002 162 7501).

- [1] Šimůnek P., Pešková M., Bertolasi V., Lyčka A., Macháček V.: Eur. J. Org. Chem. 2004, 5055-5063.  
Šimůnek P., Pešková M., Bertolasi V., Macháček V., Lyčka A.: Tetrahedron 2005, 61, 8130-8137.
- [2] Pešková M., Šimůnek P., Bertolasi V., Macháček V., Lyčka A.: Organometallics 2006, 25(8), 2025-2030.
- [3] Bárta J.: Diplomová práce, Univerzita Pardubice, 2006. Štruncová L.: Diplomová práce, Univerzita Pardubice, 2007.



Schéma

## FORMATION OF THIOUREAS BY REACTION OF ISOTHIOCYANATES WITH WEAKLY BASIC OR BETAININE AMINES PROMOTED BY DMAP

J. ŠIMBERA, P. PAZDERA

Masarykova univerzita, Přírodovědecká fakulta, Ústav chemie, Centrum pro syntézy za udržitelných podmínek a jejich management

Korešpondenční autor: [simbera@chemi.muni.cz](mailto:simbera@chemi.muni.cz)

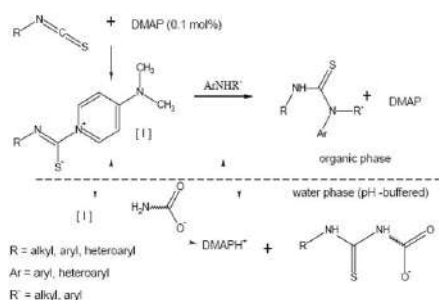
Several thousand papers and patents refer since 1970s that activation of acyl, alkoxycarbonyl or aryloxycarbonyl synthons for their coupling with N, O, C nucleophiles may be very effectively realized by an addition of 4-N,N-dialkylaminopyridine (DMAP) in catalytic amount [1].

On the other hand, formation of thioureas is not easy for reactions starting from small reactive isothiocyanates (e. g. alkyl-, electron donor substituted aryl- or heteroaryl isothiocyanates) and/or weakly basic or betaine amines (amino acids). The last mentioned betaines are insoluble in non-polar organic solvents and reactions must be frequently carried out for the most part in heterogenous two phase systems or in water - organic solvents mixture very often with poor yields.

The activation of organic isothiocyanates for reactions with small reactive isothiocyanates and/or weakly basic or betaine amines by DMAP will be demonstrated.

The activation of organic isothiocyanates for reactions with small reactive isothiocyanates and/or weakly basic or betaine amines by DMAP will be demonstrated.

- [1] Marugan R., Scriven E.F.V., Aldrich Chim. Acta 36(1), 21 (2003).



The activation of organic isothiocyanates for reactions with small reactive isothiocyanates and/or weakly basic or betaine amines by DMAP.

## SYNTÉZA PYRIMIDINOVÝCH A PURINOVÝCH NUKLEOSIDŮ A NUKLEOTIDŮ SE ZAMĚŘENÍM NA BIOLOGICKOU AKTIVITU

L. SPÁČILOVÁ<sup>1</sup>, J. HLAVÁČ<sup>2</sup>, M. HAJDÚCH<sup>3</sup>, P. DŽUBÁK<sup>3</sup>, A. HOLÝ<sup>4</sup>, M. SCHINKMANOVÁ<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Přírodovědecká fakulta UK, Katedra organické chemie

<sup>2</sup>Katedra organické chemie, PřF UP v Olomouci, Tř. Svobody 8, 771 46 Olomouc

<sup>3</sup>Laboratoř experimentální medicíny LF UP a Fakultní nemocnice v Olomouci, Puškinova 6, 775 20 Olomouc

<sup>4</sup>Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, Flemingovo nám. 2, 166 10, Praha 6

Korešpondenčný autor: [spacilova@orgchem.upol.cz](mailto:spacilova@orgchem.upol.cz)

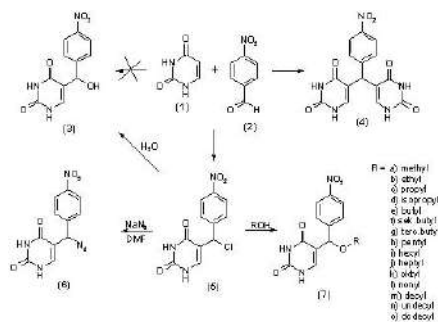
První směr výzkumu je zaměřen na syntézu 5-[alkoxy-(4-nitro-phenyl)-methyl]-uracilů (**7**) s různě dlouhým alifatickým řetězcem (C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>) a studium cytotoxické aktivity těchto derivátů v závislosti na délce a charakteru postranního řetězce. Práce vychází z publikace popisující reakci uracilu (**1**) a p-nitrobenzaldehydu (**2**) za vzniku 5-[hydroxy-(4-nitro-phenyl)-methyl]-uracilu (**3**).<sup>1</sup> Podle našich závěrů však při reakci dochází k tvorbě chlorderivátu **5**, což bylo prokázáno celou řadou dalších reakcí. ( viz. schéma )

V průběhu řešení byla připravena řada derivátů, z nichž alkoxyderiváty **7** vykazaly mírnou cytotoxickou aktivitu na nádorových liniích. Výsledky testování ukázaly, že existuje souvislost mezi délkou postranního řetězce a cytotoxickou aktivitou. Vybrané deriváty - hexyl, heptyl a oktyl derivát - byly studovány podrobněji z pohledu souvislosti inhibice syntézy DNA a indukce apoptósy.

Druhý směr výzkumu je zaměřen na syntézu a studium enzymatické aktivity N<sup>6</sup>-substituovaných-adenosinmonofosfátů a N<sup>6</sup>-substituovaných 2-aminopurin-ribosidmonofosfátů. Připravené nukleotidy byly připraveny za účelem testování enzymu N<sup>6</sup>-methyl-AMP-aminohydrolasy (meAMPH), který byl izolován z potkaních jater.<sup>2</sup> Bylo zjištěno, že tyto deriváty mohou sloužit jako alternativní substráty zmíněného enzymu, ovšem jejich aktivita je asi 3x nižší.

[1] Lam, B.L.; Pridgen, L.N.: J. Org. Chem. 1986, 51, 2592-2594.

[2] Schinkmanová, M.; Votruba, I.; Holý, A.: Biochemical Pharmacology 2006, 71, 1370- 1376.



## BEHAVIOUR OF ENAMIDOMALONATES AND ENAMINOMALONATES UNDER VARIOUS REDUCTIVE CONDITIONS AND THEIR UTILIZATION IN SYNTHESIS OF

T. SOLČAN, P. JAKUBEC, V. MILATA

Slovenská Technická Univerzita, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav organickej chémie, katalýzy a petrochémie, Oddelenie organickej chémie

Korešpondenčný autor: [tomas.solcan@stuba.sk](mailto:tomas.solcan@stuba.sk)

A behaviour of *N*-substituted enamnomalonates under various reductive conditions and several routes of their deprotection to amines is described. Mild conditions for alkylation and acylation of the amino group are depicted and will be used in synthesis of novel *N*-substituted nucleoside analogues.

The synthesis of benzimidazole nucleosides or nucleotides was encouraged by the discovery, that 5,6-dimethyl-1-( $\alpha$ -D-erythro-pentofuranosyl)-benzimidazole is a constituent of vitamin B<sub>12</sub>. In addition benzimidazole nucleotides are currently of interest due to their significant biological activity. A series of derivatives of benzimidazole with substituent groups amino, nitro, chloro, mercapto and methylmercapto, mainly on the 4- and 6-positions have been synthesized<sup>1</sup>. These compounds and some of a series of benzimidazoles has been found to be inhibitory to the development of certain viruses<sup>2</sup>.

This work was supported by Science and Technology Assistance Agency under contract No. APVT-20-007304 and Science Grant Agency 1/2448/05.

[1] McNair Scott, D.B.; Rogers, M.L.; Rose, C. J. Chem. Soc., (1958), 2165

[2] Tamm, I.; Folkers, K.; Shuk, C.H.; Heyl, D.; Horsfall, F.L. Exp. Med. (1953), 98, 245

## Prednášky – sekcia 4

### ASPEKTY HISTORICKÉHO VÝVOJE CHEMICKÝCH VÝROB VE VÝUCE CHEMIE

M. KRAITR<sup>1</sup>, V. RICHTR<sup>1</sup>, V. SIROTEK<sup>1</sup>, J. ŠTROFOVÁ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Západočeská univerzita v Plzni

<sup>2</sup>Západočeská univerzita v Plzni

Korešpondenčný autor: kraitr@kch.zcu.cz

Má-li výuka chemie ve všeobecném vzdělávání a v přípravě učitelů chemie odrážet reálný obraz chemie a jejího přínosu pro praxi, musí zdůrazňovat technicky významné chemické reakce a látky s praktickým uplatněním. Do gymnaziální výuky chemie, která obsahuje jen minimum učiva o chemických výrobcích, lze při výuce anorganické a organické chemie nenásilně začlenit zjednodušené principy výroby významných látek bez aspektů technického provedení. Přitom by se měl klást důraz na vztahy mezi jednotlivými látkami a na historický vývoj těchto vztahů. Sledování vývoje výrobních principů je vhodné zaměřit na soutěžení různých postupů týkajících se určitého výrobku (skupiny výrobků) a na hledání příčin, proč určité postupy jsou preferovány a vytlačují jiné.

Vývoj chemických výrob ovlivňuje především ekonomie výrobních procesů, rozhodující roli přitom často hraje surovinová základna. Významnými faktory jsou aspekty vlivu výrob na životní prostředí a objevy nových výrobních principů. V historickém vývoji výroby jednotlivých produktů se setkáváme s koexistencí více výrobních postupů, s inverzí vztahu výchozích látek a produktů, s vývojem v kruhu i s nepředvídanými změnami.

Charakteristické rysy vývoje chemických výrob jsou ukázány na vybraných příkladech, využitelných ve všeobecném vzdělávání a v učitelském studiu. K nejvýznamnějším zdrojům vývoje patří změna surovinové základny - přechod od uhlí k uhlovodíkovým surovinám, tj. od koksochemie a dehtochemie k petrochemii, ovlivňující mj. výrobu polymerů a motorových paliv. Jako modely vývoje postupů výroby anorganických látek jsou vhodné např. výroby kyseliny sírové, kyseliny dusičné a zpracování chloridu sodného. Jako příklady vývoje výrobních postupů organických látek mohou sloužit mj. výroby butadienu, methanolu, ethanolu, fenolu, acetonu, acetaldehydu, vinylchloridu a buničiny.

### MODERNIZÁCIA OBSAHU UČIVA CHÉMIE V ZÁKLADNÝCH ŠKOLÁCH A GYMNÁZIÁCH NA SLOVENSKU

P. SILNÝ

Katedra didaktiky prírodných vied, psychológie a pedagogiky, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Bratislava

Korešpondenčný autor: silny@fns.uniba.sk

Učebný predmet chémie v základných školách a gymnáziách patrí na Slovensku medzi najmenej obľúbené predmety. S malou obľúbenosťou chémie súvisí aj nízka úroveň vedomostí žiakov z tohto predmetu. Jednou zo základných príčin tohto stavu je aj obsah učiva chémie. Obsah učiva z chémie v ZŠ a gymnáziách je v súčasnosti predimenzovaný, nachádza sa v ňom množstvo teoretických poznatkov, ktoré učitelia z časových dôvodov sprístupňujú žiakom prevažne v hotovej podobe. Metódam problémového vyučovania sa nemôžu venovať v dostatočnej miere. V obsahu učiva (vzdelávacie štandardy, učebné osnovy, učebnice) sa nachádza tiež množstvo poznatkov, ktoré nie sú pre žiakov funkčné, zmysluplné, lebo veľmi málo súvisia s ich každodenným životom. Ak chceme skvalitniť výučbu chémie v ZŠ a gymnáziách musíme zredukovať veľké množstvo poznatkov s nízkou didaktickou hodnotou a dobre si premyslieť, ktoré poznatky z chémie bežného, každodenného života do obsahu učiva chémie zaradiť. Podľa nášho názoru treba okrem poznatkov z chémie bežného života, ktoré sú zaradené do súčasného obsahu učiva chémie v ZŠ a gymnáziách zaradiť najmä také poznatky, ktoré umožňujú pozitívne ovplyvniť kvalitu života človeka. Ide predovšetkým o chemické aspekty racionálnej výživy (potravinu, nápoje, potravinové doplnky), chemické aspekty sexuálnej výchovy (vplyv látok ako sú napr. feromóny, endorfíny, fenyletylamín, dopamín, oxytocín, testosterón a podobne na ľudský organizmus), chemické aspekty športu (výživa, iontové nápoje, endorfíny, doping atď.) ako i poznatky o vzťahoch medzi rôznymi psychickými stavmi človeka (napr. pozitívne a negatívne myslenie, strach, smiech) a vznikom rôznych látok v organizme a ich vplyv na imunitný systém človeka, na vznik a priebeh chorôb a podobne. Poznatky z uvedených oblastí sú pre žiakov nielen zaujímavé, ale umožňujú im chápať význam chémie pre život človeka, čo by sa iste odzrkadlilo vo väčšom záujme žiakov o chémiu.

### NOVÉ TECHNOLOGIE VO VÝUČBE CHÉMIE ZAMERANÉ NA POPULARIZÁCIU CHÉMIE

M. GANAJOVÁ<sup>1</sup>, L. KUKLOVÁ<sup>1</sup>, M. KOŽURKOVÁ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Oddelenie didaktiky chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovakia

<sup>2</sup>Univerzita P. J. Šafárika, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Košice

Korešpondenčný autor: maria.ganajova@upjs.sk

Cieľom príspevku je informovať o tvorbe projektových tímových prác žiakov vedúcich k popularizácii výučby chémie. Za účelom zvyšovania kvality projektových prác žiakov sme na Ústave chemických vied PF UPJS v Košiciach zriadili chemicko - environmentálne laboratórium. Laboratórium predstavuje aplikáciu moderných prvkov mobilnej analytickej inštrumentácie s možnosťou on-line



spracovania výsledkov počítačom. Pozostáva z prístrojov Fotometer Multidirect a Systém RQflex. Žiaci pod vedením učiteľa realizovali od októbra 2006 v zriadenom chemicko-environmentálnom laboratóriu exkurzie, kde analyzovali prinesené vzorky z problematiky Chémie životného prostredia (analýza hliníka, chloridov, fosforečnanov a i.) a z problematiky Chémie výživy (analýza železa, draslíka, vápnika a i.). Namerané výsledky žiaci vyhodnotili v projektových prácach. Do projektovej súťaže sa zapojilo okolo 160 žiakov z 22 základných a stredných škôl východoslovenského a stredoslovenského kraja. Najlepšie práce boli vyhodnotené a ocenené na záverečných konferenciách v júni 2007 na riešiteľských fakultách v Košiciach a v Banskej Bystrici. Z dotazníkov, ktoré žiaci po skončení tvorby prác vyplňali vyplynulo, že chemickú exkurziu na Ústave chemických vied PF UPJŠ v Košiciach hodnotili veľmi pozitívne (54 %), pretože mali možnosť stanoviť si vybrané parametre potravín a životného prostredia prostredníctvom moderných prístrojov. Na otázku, či poznatky, ktoré získali v priebehu projektovej práce majú význam pre ich život uviedli, že si lepšie uvedomili význam riešenej problematiky, získali nové poznatky a skúsenosti v chemickom laboratóriu, naučili sa pracovať v tíme a získané poznatky im pomôžu ni pri ďalšom štúdiu na vysokej škole.

*Práca vznikla z finančnej podpory projektu KEGA č. 3/3004/05 „Nové technológie vo výučbe chémie a biológie u žiakov základných a stredných škôl k trvalou udržateľnému rozvoju.“*

- [1] 1. Poráčová J., T B., Ganajová M., Lichvárová M., Kožurková M., Kukľová L., Zahatňanská M. 2006. The level of present knowledge and trends in the nutrition of the secondary school students. The International Conference , Research in Didactics of Chemistry, 2006, pp. 47-48, Kraków
- [2] 2. Poráčová, J., Sutiaková, I., Taylorová, B., Lorinšáková, D., 2005: Anwendung von PC - Technologien in Unterricht einiger naturwissenschaftlichen Facher. 8. Europaischer Chemielehrerkongress, Einstadt, 30. März - 2.April 2005, Naturwissenschaft Chemie, Austria, z. 80

## BIOCHÉMIA V OTÁZKACH

K. JOMOVÁ<sup>1</sup>, Z. JENISOVÁ<sup>2</sup>, J. MUSILOVÁ<sup>3</sup>, T. TÓTH<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Katedra chémie, Fakulta prírodných vied, Univerzita Konštantína Filozofa, Nitra

<sup>2</sup>Univerzita Konštantína Filozofa, Fakulta prírodných vied, Katedra chémie, Tr. A. Hlinku, 1, 949 74 Nitra

<sup>3</sup>Katedra chémie, Fakulta biotechnológie a potravinárstva, SPU v Nitre, Tr. A. Hlinku 2, 949 01 Nitra

Korešpondenčný autor: [kjomova@ukf.sk](mailto:kjomova@ukf.sk)

Biochémia spolu s molekulárnou biológiu, genetikou a biotechnológiami patria k najprogresívnejším vedným

disciplínam, rozmach ktorých bol podnietený rozvojom a aplikáciou fyzikálnych a analytických metód. Vďaka tomu boli získané nové hlbšie poznatky o zlúčeninách v živých systémoch, ich metabolických premenách, ako aj o prenose genetickej informácie. Implementáciu množstva nových poznatkov do vzdelávacieho procesu a ich správne chápanie pomáha riešiť využívanie informačno - komunikačných technológií [1] a tiež nový spôsob komunikácie so študentmi formou e-learningu. Kvalitné a tvorivé elektronické študijné materiály a vzdelávacie programy približujú teoretické a hlavne abstraktné časti chémie [2], súčasne však kladú vyššie nároky nielen na študenta, ale hlavne na pedagóga. Vo vzdelávacom procese by mal byť venovaný dostatočný priestor aj riešeniu rôznych typov úloh, ktoré by podporovali tvorivé myslenie študentov [3]. V predkladanom príspevku prezentujeme návrh pripravovanej zbierky riešených úloh venovanej základným zlúčeninám živej prírody, ako sú sacharidy, lipidy, aminokyseliny, peptidy, proteíny, enzýmy, koenzýmy a nukleové kyseliny. V jednotlivých kapitolách sú úlohy zoradované systematicky podľa náročnosti tak, aby riešenie danej úlohy uľahčilo riešenie nasledujúceho náročnejšieho zadania. Úlohy sú koncipované formou výberu správnej odpovede z testovej otázky, alebo odpoveďou na otázku. Nechýbajú matematické výpočty a práca s grafickým textom. Učebný text bude študentom prístupný tiež formou e-vzdelávania ako spôsob na overovanie a upevňovanie vedomostí získaných v rámci prednášok aj s možnosťou kontroly riešenia. Takto pripravený súbor riešených otázok k uvedeným tematickým oblastiam biochémie môže byť prínosom pre nadaných žiakov stredných škôl pri príprave na chemickú olympiádu, kde náročnosť úloh niekedy siahajú až na úroveň poznatkov univerzitného štúdia.

*Práca je podporovaná Ministerstvom školstva SR (projekt KEGA 3/4036/06).*

- [1] ZELENIČKÝ, Ľubomír. Modelling in a learning process of elementary, high school and university students. In Acta Didactica 8 - Modelling in Science Education. Nitra : FPV UKF, 2005, s. 7-15. ISBN 80-8050-897-6.
- [2] KYSEL, O. - JUHÁSZ, G. - MACH, P. - KOŠÍK, G.: Theoretical study of solvent effect on n-EDA complexation II. Complex between TCNE and two benzene molecules. In: Chemical Papers 61 (1) 66-72, 2007, ISSN 0366-6352
- [3] VOLLMANNOVÁ A. - POLÁČEK Š. - TREBICHALSKÝ P.: Zostavovanie a zápis chemických reakcií. In: Pedagogický seminár. SPU v Nitre. 2003. ISBN 80-8069-248-3. s 88-91

## VĚDA JE ZÁBAVA ANEB POPULARIZACE PŘÍRODNÍCH VĚD NA PRVNÍM STUPNI ZÁKLADNÍCH ŠKOL

J. SOUKUPOVÁ<sup>1</sup>, T. ŠTOSOVÁ<sup>2</sup>, L. KVÍTEK<sup>3</sup>, L. ZAJONCOVÁ<sup>2</sup>, A. PANÁČEK<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta, Katedra fyzikální chemie

<sup>2</sup>Univerzita Palackého Olomouc, Přírodovědecká fakulta, Katedra biochemie

<sup>3</sup>Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta

Korešpondenční autor: j\_soukupova@post.cz

Přírodní vědy v čele s chemií, fyzikou a matematikou se pozvolna prosazují v konkurenci humanitních oborů s nimiž až dosud obvykle nemohly soupeřit. Nezanedbatelnou zásluhu na zvrácení trendu negativistického přístupu k přírodním vědám mají neustále častěji organizované popularizační aktivity rozličných subjektů. Akademie věd se například snaží motivovat studenty středních škol zajímavými přednáškami.<sup>1</sup> Ovšem na střední škole má už většina studentů vyhraněný názor na to, čemu se v budoucnu studijně a profesně věnovat. Z tohoto důvodu je vhodné začít s popularizací přírodních věd daleko dříve. Například na Chatham College, Pittsburgh byla provedena studie zahrnující děti předškolního věku.<sup>2</sup> V rámci podprojektu „Věda je zábava“ projektu STM-Morava jsme svou pozornost zaměřili i na žáky prvního stupně základních škol.

Vzhledem k tomu, že ve školním vzdělávacím programu není snadné najít dostatek prostoru pro přírodovědně motivační experimenty, rozhodli jsme se pro založení přírodovědných kroužků. Žáci prvního stupně pracovali na předem zvoleném tématu „Voda a mléko“. Toto téma bylo zvoleno hned z několika důvodů: tyto dvě kapaliny jsou dětem dostatečně blízké, skrývají v sobě značný experimentální potenciál a v neposlední řadě mohou být zkoumány z různých úhlů pohledu (chemického, fyzikálního, geografického atd.). Žáci z prvního stupně ZŠ nás příjemně překvapili svým neutuchajícím nadšením při poznávání nových věcí a schopností vsřebávat nové informace. Navíc se ukázalo, že si některé abstraktní pojmy (např. povrchové napětí) dokáží v určité spojitosti vybavit a přesně spojit s předváděnými experimenty. Vzhledem k právě uvedeným skutečnostem můžeme bezostyšně konstatovat, že je práce s dětmi této věkové skupiny nejen možná, ale dokonce efektivní.

Autoři děkují za finanční podporu projektu MŠMT NPV II č. 2E06029.

- [1] Akademie věd : Nebojte se vědy [online]. 11.1.2007 [cit. 2007-03-01]. Dostupný z WWW: .
- [2] 2 BLASSINGAME-CLEVELAND, Christina. Kitchen Chemistry: Fun Food Activities and Experiments [online]. 7.8.2001 [cit. 2007-02-27]. Dostupný z WWW: .

## Prednášky – sekcia 5

### ZÍSKÁNÍ VODÍKU Z OBNOVITELNÝCH ZDROJŮ ENERGIE

O. PROKEŠ<sup>1</sup>, A. DOUCEK<sup>2</sup>, D. TENKRÁT<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav plynárenství, koksochemie a ochrany ovzduší

<sup>2</sup>VŠCHT Praha; Ústav plynárenství, koksochemie a ochrany ovzduší

Korešpondenční autor: ondrej.prokes@vscht.cz

Z důvodů technických a ekonomických vlastností zaujímá vodík přední místo zájmu v oblasti energetického využití. Budoucnost využití vodíku se nachází nejen v automobilovém průmyslu, ale také ve výrobě tepla a elektrické energie jak v mobilních tak i stacionárních aplikacích. Z hlediska udržitelného rozvoje je třeba stále více zaměřit pozornost na alternativní zdroje energie, zvláště pak na zdroje obnovitelné. Fosilní zdroje poskytují relativně bohatou zásobu zdroje vodíku, ovšem cílem je právě v budoucnosti eliminovat závislost lidstva na fosilních energetických zdrojích (uhlí, ropa, zemní plyn). Z tohoto důvodu je pozornost obrácena právě na obnovitelné zdroje, které poskytují dostatečně velkou zásobu pro získání vodíku. Příspěvek přináší základní možnosti získání vodíku. Každý proces je nejen popsán po stránce technologické, ale je doplněn i o SWOT analýzu.

- [1] Fernando S., Hanna M., 2004. Development of a Novel Biofuel Blend Using Ethanol-Biodiesel-Diesel Microemulsions: EB-Diesel. Energy Fuels 18, 1695-1703.
- [2] International Atomic Energy Agency, 1999. Hydrogen as an energy carrier and its production by nuclear power. ISSN 1011-4289.
- [3] Lee S., Applegate D., Ahmed S., Calderone S., Harvey T., 2005. Hydrogen from natural gas: part I – autothermal reforming in an integrated fuel processor, International Journal of Hydrogen Energy 30, 829-842.

### HYDROLÝZA LAKTÓZY V MLIEKU A SRVÁTKE POMOCOUB IMOBILIZOVANEJ B-GALAKTOZIDÁZY VO FORME LENTIKATS®

H. HRONSKA, M. ROSENBERG, Z. GROSOVÁ, L. KRIŠTOFÍKOVÁ

Slovenská technická univerzita, Fakulta Chemickej a Potravinárskej technológie, Radlinského 9, Bratislava, 812 37

Korešpondenční autor: hhronska@yahoo.com

Jedným z dôležitých biotechnologických procesov v potravinárskom priemysle je enzymatická hydrolýza laktózy použitím β-galaktózydázy. Využíva sa najmä

na prípravu bezlaktózových mliečnych výrobkov, pre zlepšenie technologických vlastností mliečnych produktov, pre odstránenie laktózy zo srvátky ako aj pri príprave D-galaktózy (1).

Hoci optimalizáciou reakčných podmienok možno dosiahnuť ekonomické zlepšenie procesu hydrolýzy pomocou voľnej  $\beta$ -galaktozidázy, najefektívnejším nástrojom je imobilizácia tohto enzýmu. Tá umožňuje opakované použitie enzýmu v kontinuálnom alebo semikontinuálnom režime. Navyiac, imobilizácia enzýmov často významne zvyšuje stabilitu a odolnosť voči inhibičným vplyvom. Ako vhodné matrice na imobilizáciu voľnej laktázy boli otestované napr. kolagén, sklo, polyakrylamid, celulóza, sefadex a pod. (2). Príkladom moderného spôsobu imobilizácie je enkapsulácia biokatalyzátora do polyvinylalkoholovej matrice šošovkovitého tvaru s názvom LentiKats<sup>®</sup>. V tejto práci sme do LentiKats<sup>®</sup> imobilizovali  $\beta$ -galaktozidázu a použili sme ich na hydrolýzu laktózy v mlieku a v srvátke. Sledovali sme podmienky efektívnej hydrolýzy UHT mlieka (polotučného aj plnotučného) ako aj možnosti opakovaného využitia imobilizovaného enzýmu. Vsádzkové hydrolýzy boli uskutočnené pri rôznych teplotách a pri hodnote pH 6,5. Pri poklese pH pod hodnotu 6,1 bol pozorovaný výrazný pokles aktivity  $\beta$ -galaktozidázy. Operačná stabilita bola sledovaná v priebehu 20 konverzií.

Časť experimentálnej práce bola venovaná aj hydrolýze laktózy v srvátke pomocou  $\beta$ -galaktozidázy z *Aspergillus oryzae* (Sigma). Hydrolýzy prebiehali pri teplote 30°C a 45°C, pH 4,5, do stupňa konverzie 90-100%.

Práca bola uskutočnená s príspevom spoločnosti LentiKats<sup>®</sup>, a.s. (ČR) a grantov VEGA (1/2391/05, 1/2390/05)

- [1] Mlichová, Z., Rosenberg, M.: Current trends of  $\beta$ -galactosidase application in food technology. J. Food Nut. Res., 45, 2006, s. 47-54
- [2] Roy I., Gupta M. N. Lactose hydrolysis by Lactozym<sup>TM</sup> immobilized on cellulose beads in batch and fluidized bed modes. Proc. Biochem 39, 2003, s. 325-332

## SLOŽENÍ TRIACYLGLYCEROLŮ V TUKOVÝCH TĚLESECH ČMELÁKŮ

I. VALTEROVÁ

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

Korešpondenčný autor: irena@uochb.cas.cz

Edita Krafková<sup>a,b</sup>, Josef Cvačka<sup>a</sup>, Jiří Kindl<sup>a</sup>, Oldřich Hovorka<sup>a</sup>, Robert Hanus<sup>a</sup>, Pavel Jiroš<sup>a,b</sup> a Irena Valterová<sup>a\*</sup>

<sup>a</sup>Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, Flemingovo náměstí 2, 166 10 Praha ;

irena@uochb.cas.cz; <sup>b</sup>Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha

V našem předchozím výzkumu jsme pozorovali podobnost ve složení sekretu labiální žlázy (samčích značkových feromonů) čmeláků a zastoupením mastných kyselin v zásobních lipidech samců<sup>1,2</sup>. Formulovali jsme hypotézu, že alifatické látky vznikají z lipidických prekurzorů po transportu do labiální žlázy a modifikaci funkčních skupin. Pro ověření této hypotézy bylo pomocí různých chromatografických technik analyzováno složení lipidů z tukových těles samců u vybraných druhů čmeláků a pačmeláků (*Bombus pratorum*, *B. silvarum*, *B. subterraneus*, *B. ruderatus*, *Psithyrus bohemicus*, *P. rupestris*).

Z tkáňových extraktů tukových těles byla izolována frakce triacylglycerolů (TAG). Jednotlivé vzorky TAG byly analyzovány metodou LC-MS s chemickou ionizací za atmosférického tlaku<sup>2</sup>. Pro lepší separaci TAG byla optimalizována metoda v nevodném chromatografickém systému a v reverzním módu, kde byly použity dvě kolony s fází C18 zapojené do série (15cm a 30cm)<sup>3</sup>. Pro lepší citlivost molekulových iontů nasycených TAG byla použita postkolonová derivatizace amonnými ionty. Získaná data byla vyhodnocena pomocí programu TriglyAPCI<sup>4</sup> a identifikace mastných kyselin byla ověřena metodou GC-MS (po převedení triacylglycerolů na methylestery mastných kyselin). Analytická data byla statisticky vyhodnocena. Z použití metody diskriminační analýzy vyplynulo, že složení triacylglycerolů v lipidech samců čmeláků je druhově specifické. Nalezené podobnosti ve složení lipidů a samčích značkových feromonů naznačují u některých druhů (*B. pratorum*, *B. ruderatus*, *B. lapidarius*) možnou souvislost mezi primárním a sekundárním metabolismem.

Práce byla provedena za podpory MŠMT (projekt číslo 2B06007).

- [1] 1. Luxová A., Valterová I., Stránský K., Hovorka O., Svatoš A.: Chemoecology 13, 81-87 (2003).
- [2] 2. Cvačka J., Hovorka O., Jiroš P., Kindl J., Stránský K., Valterová I.: J. Chromatogr. A 1101, 226-237 (2006).
- [3] 3. Holčápek M., Lísa M., Jandera P., Kabátová N.: J. Sep. Sci. 28, 1315-1333 (2005).
4. Cvačka J., Krafková E., Jiroš P., Valterová I.: Rapid Commun. Mass Spectrom. 20, 3586-3594 (2006).

## FÁZOVÉ PŘECHODY V KANDYTECH

J. COPIKOVA<sup>1</sup>, A. VESELÁ<sup>2</sup>, A. SYNYTSYA<sup>2</sup>, B. KASÍKOVÁ<sup>1</sup>, J. MAIXNER<sup>1</sup>, Z. GUSCHLOVÁ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vysoká škola chemicko-technologická Praha

<sup>2</sup>Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav chemie a technologie sacharidů, Technická 1905, 166 28 Praha 6

Korešpondenčný autor: *copikovj@vscht.cz*

Kandyty jsou nečokoládové cukrovinky, které obsahují cukry nebo jejich deriváty v amorfním stavu, barviva, ochucující látky a vodu. Fázové přechody jsou změny, které se významně projeví ve fyzikálních a senzorických vlastnostech kandytů. Jestliže se zvýší obsah vlhkosti kandytů v důsledku jejich nízké aktivity vody a vyšší relativní vlhkosti vzduchu, dojde k rozpouštění cukrů a následně pak k jejich krystalizaci. Tím dochází ke vzniku nežádoucí krystalické fáze a snížení teploty skleného přechodu. Takový výrobek znamená finanční ztrátu pro výrobce i prodejce, totiž zvýšení obsahu vody v kandytech může způsobit jak chybu v technologii, tak špatné skladování. Pomocí polarizační mikroskopie a rentgenové difrakce byla potvrzena přítomnost krystalů v senzoricky nevyhovujících kandytech vyrobených z palatinitu. Pomocí diferenční skanovací kalorimetrie byla stanovena teplota fázového přechodu a obsah nežádoucích krystalů v kvalitním a senzoricky poškozeném výrobku.

*Tento příspěvek je součástí projektu MŠMT 6046137305*

### STEREOSELEKTIVITA A KONFORMAČNÍ STABILITA HALOGENALKANDEHALOGENASY DBJA Z BRADYRHIZOBIUM JAPONICUM USDA110

R. CHALOUPOKOVÁ<sup>1</sup>, Z. PROKOP<sup>1</sup>, M. STRAKOVÁ<sup>1</sup>, Y. SATO<sup>2</sup>, Y. NAGATA<sup>2</sup>, J. DAMBORSKÝ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Loschmidtovy laboratoře, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Kamenice 5/A4, 625 00 Brno

<sup>2</sup>Graduate School of Life Sciences, Tohoku University, Katahira, Sendai 980-8577

Korešpondenčný autor: *radka@chemi.muni.cz*

V této práci byl studován vliv teploty a pH na strukturní stabilitu, oligomerizační chování, aktivitu a enantioselektivitu halogenalkandehalogenasy DbjA z *Bradyrhizobium japonicum* USDA110<sup>1</sup>. Tento enzym jako jediný z rodiny halogenalkandehalogenas existuje v oligomerní formě, vykazuje novou substrátovou specifitu<sup>1</sup> a je současně první halogenalkandehalogenasou s prokázanou enantioselektivitou<sup>2</sup>. Vysoká enantioselektivita DbjA byla detekována vůči  $\beta$ -substituovaným bromovaným alkanům a bromovaným esterům<sup>2</sup>. Konformační změny DbjA byly sledovány pomocí spektroskopie cirkulárního dichroismu. Ze strukturního hlediska vykazoval enzym velkou toleranci ke změně pH. Jeho sekundární struktura nebyla ovlivněna v rozsahu pH 5,3-10,3 a jeho terciální struktura v rozsahu pH 6,2-10,1. Pomocí gelové filtrace bylo zjištěno, že oligomerizační chování DbjA souvisí se změnou pH. Monomerní, dimerní, tetramerní a vysokomolekulární forma enzymu byly identifikovány v roztoku při různém pH. Kromě toho bylo zjištěno, že různé oligomerní stavy DbjA vykazují různou teplotní stabilitu.

Nejvyšší teplotní stabilita,  $T_m = 49,1 \pm 0,2$  °C, byla detekována při pH 6,5, kdy DbjA existuje jako dimer. Maximální aktivita DbjA byla naměřena při teplotě 50 °C a pH 7,7-10,4. Snížením reakční teploty docházelo k prudkému nárůstu enantioselektivity enzymu. Teplotní závislost enantioselektivity byla studována se substráty 2-brompentanem, metyl 2-brompropionátem a etyl 2-brombutyrátem. Následně byly vypočteny diferenční aktivitační parametry,  $\Delta_{R-S}\Delta H^\ddagger$  a  $\Delta_{R-S}\Delta S^\ddagger$ . Výsledky získané z termodynamické analýzy ukázaly, že enantiomerní rozlišování  $\beta$ -substituovaných bromovaných alkanů enzymem DbjA je řízeno převážně entropickým příspěvkem, zatímco rozlišování bromovaných esterů příspěvkem entalpickým. Rozdílné termodynamické příspěvky pozorované pro skupinu alkanů a esterů, podpořené předchozími výsledky z mapování substrátů a molekulového modelování<sup>2</sup> dokládá dvě různé strukturní podstaty enantioselektivity DbjA.

- [1] Sato, Y. Monincová, M., Chaloupková, R., Prokop, Z., Ohtsubo, Y., Minamisawa, K., Tsuda, M., Damborský, J., Nagata, Y., Applied and Environmental Microbiology 71 (2005) 4372-4379.
- [2] Prokop Z., Sato Y., Mozga T., Jeřábek, P., Natsume R., Janssen D. B., Florián, J., Tsuda M., Nagata Y., Senda T., Damborský, J. předloženo k publikaci.

### Prednášky – sekcia 6

#### NOVÉ PROCESY A MATERIÁLY PRE CHEMICKÝ PRIEMYSEL

V. MACHO<sup>1</sup>, M. KAVALA<sup>2</sup>, M. OLŠOVSKÝ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Fakulta priemyselných technológií TnUAD, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov

<sup>2</sup>VUP, a. s., Nábřežná 4, 971 04 Prievidza

Korešpondenčný autor: *macho@fpt.tnuni.sk*

S využitím vlastných pôvodných výsledkov i s modifikáciou známych riešení autori prezentujú vybrané procesy a materiály využiteľné v stredoeurópskom regióne. Z organochemických procesov je to selektívna hydrobromácia alylchloridu bromovodíkom na 1-chlór-3-brompropán bez potreby peroxidov. Selektívna oxidácia p-xylénu s O<sub>2</sub> na kyselinu tereftalovú, 3-metylpyridínu na pyridínkarboxylovú kyselinu, nitrácie alkánov a cykloalkánov za miernych podmienok na nitrozlučieniny. Príprava alkylénkarbonátov s olefínoxidom a CO<sub>2</sub>, či už ako cenného produktu alebo medziproduktu selektívnej prípravy glykolov, ale navyše za použitia metanolu alebo etanolu aj dimetyl- alebo dietylkarbonátu ako vysokokotánových komponentov do benzínov. Proces prípravy

alkylvinyléterov a ďalších vinylových zlúčenín vinyláciou acetylénu na superbázických katalyzátoroch.

Tiež príprava ekologicky prijateľných zmäkčovadiel PVC na báze vedľajších produktov výroby izoprénu alebo esterov kyseliny citrónovej. Potom substitúcia styrénu ako sieťovacieho komonoméru pri výrobe a aplikácii nenasýtených polyesterov vysokovrúcimi dostupnými komonomérmi. Príprava kopolymérov vinylchloridu s alkénmi radikálovo-koordinačnou kopolymerizáciou s požadovanými obsahmi zakopolymerizovaných alkénov a v neposlednom rade príprava multikomponentnej kopolymérnej síry ako nového vulkanizačného činidla nenasýtených kaučukov.

### MOŽNOSTI VYUŽITÍ GLYCERINU PŘI VÝROBĚ CHEMICKÝCH KOMODIT A KOMPONENT DO PALIV

J. KOLENA

VÚANCH

Korešpondenčný autor: *Jiri.kolena@vuanch.cz*

V práci jsou diskutovány možné směry využití glycerinu v oblasti stredo- a velkotonážních výrob. Studie se opírá především o poznatky z literatury, konfrontované v některých případech s výsledky vlastního výzkumu. Pozornost je věnována hlavně procesům výroby jednosytných a dvojsytných alkoholů, dále pak étherům a acetalům glycerinu, které mohou být využity jako kyslíkaté komponenty do motorových paliv.

### THE STRUCTURE AND PROPERTIES OF FIBROUS MATERIALS BASED ON TYPE OF SYNTHETIC AND MICROBIAL FIBRES

E. BENČÍKOVÁ<sup>1</sup>, K. ŠČASNÍKOVÁ<sup>2</sup>, M. JAMBRICH<sup>1</sup>, L. HAJDÚCHOVÁ<sup>2</sup>, M. ŠIARNIK<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Trenčianska univerzita, Fakulta priemyselných technológií, Katedra chémie a technológie polymérov a textilu

<sup>2</sup>Fakulta priemyselných technológií TnUAD, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov

<sup>3</sup>QUILTEX a.s.

Korešpondenčný autor: *bencikova@fpt.tuni.sk*

The paper deals with the preparation, structure and properties of fibrous materials based on special types of synthetic and microbial fibres, especially polyester (PES) and polylactide (PLA) fibres. Clothing and habitation are one of the basic social and personal human needs as they offer protection against the caprices of nature (weather) and serve also as a manifestation of personal preferences in terms of type and style of clothes. Housing textiles represent an important part of human habitations. Blankets and pillows also fall within this area.

Nowadays, nasal allergy and asthma are being ranked among the most widespread illnesses. One of the causes of allergic reactions is the presence of dust particles (both inorganic and organic) in the indoor air of home environment. Housing textiles (pillows and blankets) can be a source of such dust particles. One possibility of how to decrease the reproduction and subsequent spreading of allergens in the air is the use of hydrophobic fillings with the thermal-insulating properties similar to natural materials. Synthetic fibres that best meet these criteria are those absorbing only a small amount of moisture and consequently preventing the creation of suitable conditions for microorganisms' growth. Recently, researches have been focused on microbial polymer systems based on non-toxic natural renewable products. The production of polylactic acid is the one the most explored, but there are also other well-known polymers such as polycaprolacton, polybutylene succinate and poly-3-hydroxybutyrate.

Our experimental work was focused on the preparation of fleeces for housing textiles - blankets and pillows made from special PLA and PET types of fibres. We also evaluated their macromorphological structure, physical-mechanical and physiological properties and other utility properties.

*This work was sponsored by grant VEGA SR, No. 1/2451/05*

- [1] Sýkorová, J., Šiarnik, M., Hajdúchová, L., Jambrich, M.: Štruktúra a vlastnosti vlákňitých materiálov na báze špeciálnych typov PES vlákien. *Chemické listy*, 98, 2004, s.576
- [2] Krischbaum, D.L.: Polylactide (PLA) polymers. Where performance comes naturally. Fiber Producer/Textile Industry Conference, Clemson Univ., Palmetto Expo Center, Greenville, USA, October 24-25, s.1-11
- [3] Jambrich, M., Gundzová, M.: Príprava mikrobiálnych typov vlákien-Štúdia rozvoja polyaktidových vlákien, *Technické textílie*, FPT TnU AD Púchov, 2005, s.1-23

### SURFACE-ACTIVE, PHYSICO-CHEMICAL AND PERFORMANCE PROPERTIES OF HYDROPHOBICALLY MODIFIED CARBOXYMETHYLCELLULOSE DERIVATIVES

V. TOMANOVÁ<sup>1</sup>, I. SROKOVÁ<sup>2</sup>, A. MALOVIKOVÁ<sup>3</sup>, A. EBRINGEROVÁ<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Fakulta priemyselných technológií TnUAD, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov

<sup>2</sup>Faculty of Industrial Technologies, University of Alexander Dubček in Trenčín, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov

<sup>3</sup>Center of Excellence of the Slovak Academy of Sciences, Institute of Chemistry; 845 38 Bratislava, Slovakia

Korešpondenčný autor: tomanova@fpt.tnuni.sk

Carboxymethylcellulose (CMC, DS=1) was partially hydrophobized in order to prepare polymeric surfactants. The chemical modification were performed by transesterification of CMC with methyl ester of rape seed oil (MERO) and vinyl laurate (Vila) in two different reaction media (i) DMF/TSA and (ii) H<sub>2</sub>O/DMF with and without catalyst at various reaction conditions using microwave irradiation with controlled power as heating source[1]. The obtained hydrophobically modified CMC (HM-CMC) were characterized by FTIR spectroscopy and compared in terms of the surface-active, molecular and performance properties. The surface-active properties of aqueous solutions of HM-CMC derivatives were determined by surface tension and critical micelle concentration. However, the surface tension measuring was used for study of polymer-surfactants complexation between cationic surfactants (dodecyltrimethylammonium bromide, tetradecyltrimethylammonium bromide and hexadecyltrimethylammonium bromide) and HM-CMC derivatives in aqueous media similarly as described autors[2,3]. The viscosimetric properties of aqueous sodium chloride solutions of CMC and their HM-CMC derivatives were investigated in dilute domain. The performance properties of new HM-CMC derivatives were tested by studying their washing power and antiredeposition efficiency. The prepared derivatives showed, in spite of moderate surface tension-lowering effects, excellent emulsifying activity for oil in water type emulsions as well as good performance properties. The viscometric measurement indicate that the incorporation of hydrophobic substituents induces intramolecular associations in dilute solutions. The novel CMC esters represent biodegradable polymeric surfactants with potential applications in manufacture of consumer products and in industrial processes.

*Acknowledgements: This work was financially supported by the Slovak Grant Agency VEGA, project No. 2/6131/26; APVT - 20 - 017 - 304 and CUGA 3/2006 and 4/2006*

- [1] TOMANOVÁ, V., PIELICHOWSKI, K., SROKOVÁ, I., ŽOLDÁKOVÁ, A., POLACZEK, J., PIELICHOWSKI, J., In: Pielichowski, K., (ed) Modern Polymeric Materials for Environmental Applications, Wydawnictwo DjaF, Krakow, vol. 2, 31-36, 2006.
- [2] MATA, J., PATEL, J., JAIN, N., GHOSH, G., BAHADUR, P.: Journal of Colloid and Interface Science, 297, 797-804, 2006.
- [3] BARCK, M., STENIUS, P.: Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Asp. 89, 59-69, 1994.

## NÁHRADA KAUČUKOV V GUMÁRENSKÝCH ZMIESIACH GUMOVOU DRVINOU

V. MACHO<sup>1</sup>, B. CÍBIK<sup>2</sup>, J. MICHÁLEK<sup>3</sup>, M. OLŠOVSKÝ<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Trenčianská Univerzita Alexandra Dubčeka Fakulta priemyselných technológií Katedra chémie a technológie polymérov

<sup>2</sup>Vipotest, s. r. o., T. Vansovej 1054/45, 020 32 Púchov

<sup>3</sup>Výskumný ústav gumárenských - Matador, a. s., T. Vansovej 1054/45, 020 32 Púchov

<sup>4</sup>Fakulta priemyselných technológií TnUAD, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov

Korešpondenčný autor: vmacho@post.sk

Analyzujú sa doterajšie spôsoby zhodnotenia alebo využitia gumovej drvinu, so stručným zhodnotením predností a problémov. Najnádejnejšie sú procesy využívajúce devulkanizáciu gumovej drvinu - vulkanizátov fyzikálnymi, fyzikálno-mechanickými alebo chemickými spôsobmi. K takým patrí aj inšpirujúci postup [1, 2] devulkanizácie, ktorý možno uskutočňovať už pri teplote 80 °C, kedy sa ešte neštiepia chemické väzby C-C makromolekúl kaučukov, pričom štiepenie prebieha heteropolárnym mechanizmom, s využitím bežných dostupných modifikátorov devulkanizácie, ako dietylenglykolu, karboxylových kyselín C<sub>16</sub> - C<sub>24</sub>: Mierou aktivity modifikátora gumovej drvinu je koeficient aktivity  $\alpha_f$ . Stúpajúce kladné hodnoty sú mierou aktivity, so zápornou hodnotou sú prakticky neaktívne.

Modelovými experimentami za použitia hlavne gumovej drvinu na báze SBR sme preukázali, že z hľadiska účinnosti ako najkvalitnejšie sa ukázali: kyseliny repkového oleja neutralizované s monoetanolamínom ( $\alpha_f = 0,432$ ), s trietanolamínom ( $\alpha_f = 0,482$ ) a s dietanolamínom ( $\alpha_f = 0,7396$ ). Potom samotný glycerol ( $\alpha_f = 0,374$ ), monoetanolamín ( $\alpha_f = 0,335$ ), dietanolamín ( $\alpha_f = 0,462$ ), dietylenglykol s dietanolamínom - mol. 1 : 2 ( $\alpha_f = 0,467$ ). Výsledky sa potvrdili aj na reálnej bočnicovej zmesi s obsahom až 30 % hmot. drvinu. To je však najvyšší prípustný obsah drvinu, aby nedošlo k zhoršeniu fyzikálno-mechanických vlastností vulkanizátov. Vysvetľuje sa mechanizmus vplyvu modifikátora.

- [1] Wolff S.: Kautschuk Gummi Kunststoffe, 23, 7 (1970).
- [2] Slusarski L, Sendlewski R.: Gummi, Azbest, Kunststoffe, 36, 540 (1983).

## VYUŽITIE PLAZMY NA MODIFIKÁCIU POVRCHU POLYETYLÉNU

M. ŠTEVIAR<sup>1</sup>, I. NOVÁK<sup>1</sup>, I. CHODÁK<sup>1</sup>, M. ŠPÍRKOVÁ<sup>2</sup>, M.M. CHEHIMI<sup>3</sup>, J. MOSNÁČEK<sup>1</sup>, A. KLEINOVÁ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústav polymérov, Slovenská Akadémia Vied, Dúbravská cesta, SK-84236 Bratislava, Slovenská republika

<sup>2</sup> Ústav makromolekulární chemie, Akademie věd České republiky, Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6

<sup>3</sup> ITODYS, Université Paris 7-Denis Diderot 75005 Paris

Korešpondenčný autor: upolstev@savba.sk

Nízkohustotný polyetylén (LDPE) bol modifikovaný plazmou bariérového výboja (SBD). Modifikácia povrchu LDPE fólií bariérovou plazmou zlepšuje adhéziu medzi LDPE a polárnejšími polymérmi, pričom sa vytvárajú nové polárne funkčné skupiny, ktoré možno využiť na očkovanie polyméru s diazo-zlúčeninami alebo vinyzilánmi. Bol zistený významný prírastok povrchovej energie a jej polárnej zložky po modifikácii LDPE bariérovou plazmou v kyslíku alebo v dusíku pri atmosférickom tlaku. Očkovanie LDPE modifikovaného plazmou vinyltrimetoxysilánom zvyšuje povrchovú energiu polyméru. FTIR-ATR spektrum LDPE modifikovaného plazmou poskytlo absorbné pásy, ktoré zodpovedajú karbonylovým skupinám vznikajúcim pri modifikácii polyméru. ATR spektra LDPE očkovaného vinyltrimetoxysilánom potvrdili vytvorenie nových väzieb s nízkou intenzitou, ktoré zodpovedajú vlnočtom 3063, 3021 a 2957  $\text{cm}^{-1}$  a aj 1407 a 1435  $\text{cm}^{-1}$ , ktoré patria vibráciám C-H väzieb v Si-O-CH<sub>3</sub>. XPS analýza modifikovaného LDPE ukázala rast pomeru atómov O/C z 0.011 na 0.16 po modifikácii plazmou. Bol zistený vznik rôznych polárnych dusíkatých a kyslíkatých funkčných skupín: C-N, C-O, C=O, O-C=O a N-C=O. AFM merania LDPE modifikovaného SBD plazmou nezistili významné rozdiely vo výškovom profile vzoriek, boli však pozorované určité miesta na povrchu, ktoré sa vytvorili následkom roztavenia polyméru.

Slovenskej Grantovej Agentúre VEGA (projekt č. 2/7103/27 a Akadémie vied Českej republiky (projekt č. AVOZ 40500505) za finančnú podporu výskumu.

- [1] Ráhel J, Šimor M, Černák M, Štefečka M, Imahori Z, Kando M. Surf. Coat. Technol. 169-170 (2003) 604.
- [2] H. Drnovská, L. Lapčík, V. Bursíková, J. Zemek, A.M. Barros-Timmons, Coll. Polym. Sci. 281 (2003) 1025.
- [3] I. Novák, M. Števiar, I. Chodák, Monatshefte für Chemie/Chemical Monthly 137 (2006) 943.

## Postery – sekcia 1

### 1Po-Ut1

#### PRŮTOKOVÁ ANALÝZA AGROCHEMIKÁLIÍ S ELEKTROCHEMICKOU DETEKCIÍ NA STŘÍBRNÉ PEVNÉ AMALGÁMOVÉ ELEKTRODĚ

J. FISCHER<sup>1</sup>, J. BAREK<sup>1</sup>, J. ZIMA<sup>1</sup>, K. PECKOVÁ<sup>1</sup>, B. YOSYPCHUK<sup>2</sup>, T. NAVRÁTIL<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Albertov 6, CZ 12843 Praha 2

<sup>2</sup> Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., Dolejškova 3, 182 23 Praha 8

Korešpondenčný autor: jfischer@natur.cuni.cz

Průtoková analýza je účinným nástrojem pro rychlou a automatickou analýzu velkých sérií vzorků. Může být plně automatizována a tím dosáhnout vyšší přesnosti v kratším čase než srovnatelné, manuálně připravované vzorky. Selektivní detekce si však žádá vývoj nových senzorů. Mezi ně patří i netoxická stříbrná pevná amalgámová elektroda (AgSAE) [1] - leštěná, nebo modifikovaná rtuťovým meniskem, která si zachovává výhodné vlastnosti klasických rtuťových elektrod, ale minimalizuje užití kapalné rtuti, jejíž používání je v poslední době omezovalo vzhledem k neopodstatněným obavám z její toxicity. [2] V současnosti rostou požadavky na analytické metody použitelné ke sledování různých biologicky aktivních účinných látek agrochemických přípravků v environmentálních maticích. V předloženém příspěvku bude věnována pozornost stanovení 2-methyl-4,6-dinitrofenolu (MDNF) - selektivního herbicidu, používaného při pěstování obilí, chmele, vinné révy a ovoce. Běžně dostupné přípravky obsahují jeho alkalické a amonné soli, které jsou snadno rozpustné ve vodě. Přesto že byl US EPA již v roce 1987 zakázán kvůli dlouhodobým zdravotním vlivům na člověka, je stále skladován a používán v řadě států, hlavně třetího světa. MDNF snadno prostupuje půdou a jen pomalu podléhá mikrobiální biodegradaci. V rámci vývoje metody pro jeho stanovení, při využití Brittonova Robinsonova roztoku o pH 4 jako nosného roztoku byl sledován vliv potenciálu elektrody, průtokové rychlosti i dávkovaných objemů vzorku na získaný signál. Pro srovnání byl před elektrochemický detektor zařazen ještě UV detektor měřící při vlnové délce 268,5 nm. Nalezené optimální podmínky (-1,1 V, 3  $\text{ml}\cdot\text{min}^{-1}$ , 50  $\mu\text{l}$ ) umožňují stanovit i mikromolární koncentrace s frekvencí analýz až 180  $\text{h}^{-1}$  a relativní směrodatná odchylka nepřesahující 3%.

[1] B. Yosypchuk, L. Novotný, Crit. Rev. Anal. Chem. 2002, 32, 141.

[2] J. Barek, J. Fischer, T. Navrátil, K. Pecková, B. Yosypchuk, J. Zima, Electroanalysis 2007, v tisku.

**1Po-Ut2****POLAROGRAFICKÉ A VOLTAMETRICKÉ  
STANOVENÍ SUBMIKROMOLÁRNÍCH  
MNOŽSTVÍ GENOTOXICKÉHO  
5-NITROBENZIMIDAZOLU**

V. VYSKOČIL, D. DEÝLOVÁ, J. MUSILOVÁ, K. PECKOVÁ,  
J. BAREK

*Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické  
chemie, UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Albertov  
6, CZ 12843 Praha 2*

Korešpondenční autor: [barek@natur.cuni.cz](mailto:barek@natur.cuni.cz)

5-nitrobenzimidazol (5-NBIA) (Obr. 1) patří do skupiny nitrovaných heterocyklických aromatických sloučenin, jejichž přítomnost v životním prostředí může ohrozit přirozené biologické funkce živé přírody s negativním dopadem na zdravý vývoj organismů. Výskyt této láky v životním prostředí lze očekávat v úzkém spojení s chemickými procesy probíhajícími při spalování fosilních paliv [1]. 5-NBIA, látka v minulosti užívaná a polarograficky stanovována jako součást ustalovače pro barevné fotografie [2], je dnes prokázaným karcinogenem a mutagenem [3].

Tato práce je zaměřena na optimalizaci podmínek stanovení 5-NBIA ve vodném prostředí na rtuťových elektrodách pomocí rozšířených polarografických a voltametrických metod. Navazuje tímto na práci pojednávající o stanovení genotoxických nitroderivátů polycyklických aromatických uhlovodíků [1]. Pro analytické stanovení 5-NBIA byly použity techniky DC tast polarografie (DCTP) na klasické rtuťové kapkové elektrodě (DME), diferenční pulsní polarografie (DPP) na DME, DC voltametrie (DCV) na miniaturizované visící rtuťové kapkové elektrodě (HMDE), diferenční pulsní voltametrie (DPV) na HMDE a adsorpční rozpouštěcí voltametrie (AdSV) na HMDE.

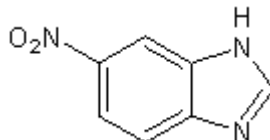
Byly nalezeny optimální podmínky pro polarografické a voltametrické stanovení 5-NBIA ve vodném prostředí. Za těchto podmínek byly pro 5-NBIA pomocí technik DCTP, DPP, DCV a DPV proměřeny kalibrační závislosti a vypočteny meze stanovitelnosti  $2,1 \cdot 10^{-6} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$  pro DCTP,  $2,2 \cdot 10^{-7} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$  pro DPP,  $2,2 \cdot 10^{-7} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$  pro DCV a  $4,6 \cdot 10^{-8} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$  pro DPV. Byl proveden pokus o další zvýšení citlivosti stanovení a snížení meze stanovitelnosti pomocí techniky AdSV na HMDE. Na základě změřených DCT polarogramů a pomocí metody cyklické voltametrie na HMDE byl navrhnut mechanismus elektrochemické redukce 5-NBIA, který byl následně ověřen pomocí potenciostatické coulometrie na rtuťovém dně.

*Tato práce byla finančně podpořena MŠMT ČR (projekty LC 06035 a MSM 0021620857) a GAUK (projekt 6107/2007/B Ch/PrF).*

[1] Barek J., Cvacka J., Muck A., Quaiserova V., Zima J.: *Electroanalysis* 13, 779 (2001).

[2] Canterford D. R.: *J. Photogr. Sci.* 26, 65 (1978).

[3] Rosenkranz H. S., Karol M. H.: *Mutat. Res.* 431, 81 (1999).



1 - Strukturální vzorec 5-nitrobenzimidazolu

**1Po-Ut3****IDENTIFIKACE DEZINFEKČNÍCH LÁTEK A  
ROZTOKŮ POUŽÍVANÝCH VE  
ZDRAVOTNICKÝCH ZAŘÍZENÍCH  
V KONTAKTU S TEXTILNÍMI MATERIÁLY**

M. KLUČÁKOVÁ, I. HELÍSKOVÁ

*Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická*

Korešpondenční autor: [klucakova@fch.vutbr.cz](mailto:klucakova@fch.vutbr.cz)

Častým problémem, se kterým se nemocnice téměř denně potýkají, jsou nevypratelné skvrny, které způsobují, že textilní materiál není možné zejména z estetických důvodů dále v nemocničním provozu používat. Bylo zjištěno, že nevypratelné skvrny jsou způsobeny kombinací některých dezinfekčních prostředků s krví, nikoliv tedy dezinfekčními prostředky samotnými. Jedná se o takové dezinfekční roztoky, které ve svém základním složení obsahují propan-1-ol nebo propan-2-ol.

Skutečnost, že nevypratelnost je způsobena přítomností rozpouštědel propan-1-ol nebo propan-2-ol v dezinfekčním prostředku a jejich následná reakce s krví byla rovněž potvrzena tím, že na textilní materiál byla aplikována skvrna krve s propan-1-olem a skvrna krve s propan-2-olem. Textilie byla vystavena průmyslovému praní, jehož výsledkem byla přítomnost nevypratelných skvrn.

Problematické skvrny byly analyzovány pomocí infračervené spektroskopie. Byly identifikovány celkem tři pásy, které se objevují pouze ve spektrech krve s „problematičtějšími“ dezinfekčními prostředky, naopak ve spektrech krve s „neproblematičtějšími“ dezinfekčními prostředky se tyto pásy nevyskytují. Jsou tedy výsledkem interakce krve s dezinfekčními prostředky, jejímž výsledkem jsou nevypratelné skvrny na textilních materiálech. Tyto pásy byly též pozorovány ve spektrech propan-1-olu a propan-2-olu s krví, naopak kombinace ethanolu s krví, stejně jako dezinfekční prostředky obsahující ethanol, ve spektrech tyto pásy neměly a nanášené skvrny se bez problémů vypraly.



**1Po-Ut4****ANALYSIS OF MICROORGANISMS BY CAPILLARY ELECTROPHORESIS**

O. RYPAROVÁ<sup>1</sup>, J. PETR<sup>1</sup>, J. ZNALEZIONA<sup>1</sup>, V. MAIER<sup>1</sup>, M. KOWALSKA<sup>2</sup>, J. ŠEVČÍK<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Tř. Svobody 8, 771 46 Olomouc

<sup>2</sup>Univerzita Palackého Olomouc, Přírodovědecká fakulta, Katedra biochemie

Korešpondenčný autor: [petrjan1@gmail.com](mailto:petrjan1@gmail.com)

Capillary electrophoresis represents a powerful separation technique widely used in the field of bioanalysis. One of the interesting tasks that have been studied since capillary electrophoresis was born is analysis of high molecular mass species like proteins, nucleic acids, and moreover higher systems like organelles, and microorganisms. Separation of microorganisms, nowadays studied mainly by group of Professor Armstrong, can be very favorable for screening purposes. Capillary electrophoresis employing 4 mM boric acid, 4 mM TRIS and 0.5 mM EDTA with 0.02 % (w/w) PEO provides high effective separation of microorganisms with migration times to 60 min that means more than 20-fold shortening of analysis time in comparison with common microbiological tests. In our work, we studied electrophoretic behavior of common microorganisms *Escherichia coli* and *Sacharomyces cerevisiae*.

*The financial support of the Research Project MSM6198959216, the Kontakt Program ME 895, the Project STM-Morava MŠMT 2E06029, and the Project Badatel is gratefully acknowledged.*

**1Po-Ut5****STUDIUM SPECIACE U(VI) METODOU TRLFS**

E. HOMZOVÁ

České vysoké učení technické v Praze, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská

Korešpondenčný autor: [homzova@post.sk](mailto:homzova@post.sk), [homzova@jfifi.cvut.cz](mailto:homzova@jfifi.cvut.cz)

Metoda TRLFS - *Time Resolved Laser(-Induced) Fluorescence Spectroscopy* (časově rozlišená laserem indukovaná fluorescenční spektroskopie) byla vyvinuta v 80. letech minulého století pro stanovení nízkých koncentrací U(VI), trojmocných aktinidů (Cm, Am) a lanthanidů. Od 90. let je užívána i pro speciaci fluoreskujících prvků. TRLFS se vyznačuje vysokou citlivostí a selektivitou, která je dána třemi parametry - excitační vlnovou délkou, emisním fluorescenčním spektrem a jeho časovým rozlišením (měřením doby života fluorescence). Fluorescenční vlastnosti U(VI) a jeho fyzikálně-chemických forem v roztoku, koloidech i tuhé fázi či na jejím povrchu patří k nejvíce popsaným díky studiu chování uranu přítomného v životním prostředí v důsledku jeho využití

jako paliva v jaderné energetice.

Na ČVUT v Praze ve spolupráci s Institute of Radiochemistry, Forschungszentrum Rossendorf, je uvedena do provozu nová laboratoř TRLFS. Jádrem instalovaného systému je laditelný laser s optickým parametrickým oscilátorem Vibrant 355 II (Opotec), čerpaný Nd: pulsním laserem Brilliant s moduly SHG, THG, FHG pro 2., 3. a 4. harmonickou frekvenci a modulem UV<sub>3</sub>-E pro rozšíření do UV oblasti. Dále systém zahrnuje termostatovaný prostor pro uchycení kyvety se vzorkem včetně optiky pro sběr signálu a fokusaci svazku na vzorek, a monochromátor/spektrograf se 4 mřížkami, mikrometricky stavitelnou štěrbinou a výstupem optickým vláknem. Základem detekční části je ICCD kamera DH720i-18F-03 (Andor).

Příspěvek podává přehled systémů (forem U(VI)), které lze pomocí metody studovat, a jejich základních spektrometrických vlastností (střední doba života fluorescence a parametry emisního spektra). Na příkladu studia vazby U(VI) huminovou kyselinou je ilustrován základní postup vyhodnocení a interpretace časově rozlišeného fluorescenčního emisního spektra.

**1Po-Ut6****GAS CHROMATOGRAPHIC DETERMINATION OF D- AND L-AMINO ACIDS PRODUCED BY CYANOBACTERIA ON CHIRASIL-VAL AFTER DERIVATIZATION WITH PENTAFLUOROPROPYL CHLOROFORMATE**

H. ZAHRADNÍČKOVÁ<sup>1</sup>, P. HUŠEK<sup>1</sup>, P. ŠIMEK<sup>1</sup>, P. HARTVICH<sup>1</sup>, B. MARŠÁLEK<sup>2</sup>, I. HOLOUBEK<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Biologické centrum AVČR, v.v.i., Entomologický ústav, Laboratoř analytické biochemie

<sup>2</sup>RECETOX, Masarykova univerzita, Přírodovědecká fakulta, Brno

Korešpondenčný autor: [helenaz@bclab.eu](mailto:helenaz@bclab.eu)

A rapid and simple method was developed for the determination of free amino acids (AAs) released from cyanobacteria. The procedure involves trapping of AAs from the centrifuged cyanobacterial culture fluid on a cation-exchange resin, their release together with the resin by a direct treating with the reaction medium, followed by immediate derivatization with a corresponding chloroformate. The extractive alkylation does transfer the analytes into an organic phase, aliquot of which is subjected to GC analysis. Identification and quantification of AAs was performed by GC/MS and GC/FID, respectively, using propyl chloroformate as the derivatization reagent. For chiral analysis, the cyanobacteria extracts were treated with 2,2,3,3,3-pentafluoropropyl chloroformate to create more volatile analytes. Separation of the AA enantiomers was accomplished on a Chirasil-

Val capillary column and the D/L- enantiomeric ratios were determined. AAs of cyanobacteria are considered to be important for the assessment of the energy flow in aquatic food web, nutrition value of cyanobacteria in food web and for cell-cell communication within cyanobacteria. The highest levels of AAs were found in summer period at the beginning of the season (July). In the September and October samples, not only the amount of AAs was lower but also the number of D-AAs decreased; but the D/L ratio was higher than in the sample from July. Based on the obtained results it can be assumed that young populations excrete AAs in higher concentrations and another composition than actively growing populations.

*The financial support by the Grant Agency of the Czech Republic, project No.303/06/1674 is acknowledged.*

- [1] H. Zahradníčková, P. Hušek, P. Šimek, P. Hartvich, B. Maršálek, I. Holoubek, Gas chromatographic determination of D- and L-amino acids produced by cyanobacteria on Chirasil-Val after derivatization with pentafluoropropyl chloroformate, Anal. Bioanal. Chem. (2007), in press.

#### 1Po-Ut7

### INFLUENCING OF PROPERTIES OF MIXED OXIDE CATALYSTS USING

D. KOBLIHA

*České vysoké učení technické v Praze, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská*

Korešpondenčný autor: [dankobl@post.cz](mailto:dankobl@post.cz)

The catalytic activity and selected physico-chemical properties of NiO-WO<sub>3</sub> catalysts containing variable ratio of both component was studied. Catalytic activity was tested using hydrogen peroxide decomposition on catalyst surface. Gamma rays irradiation and accelerated electrons irradiation were used to affect some physico-chemical properties of catalysts. Both kinds of irradiation led only to small change in surface oxidative properties. No change of the catalytic activity was observed. The heat treatment of the samples led only to change of specific surface and surface oxidative properties. Considerable changes of catalytic activity of pure NiO were caused by implantation of nitrogen ions into the surface of NiO, probably due to formation of new catalytic sites.

**Keywords:** Catalytic activity, hydrogen peroxide decomposition, surface oxidative ability, irradiation, heat treatment, implantation of nitrogen ions

*This work was performed under the auspices of Ministry of Education, Youth and Sports grant MSM 68-4077-0040.*

#### 1Po-Ut8

### STANOVENÍ VOLNÝCH PLAZMATICKÝCH METANEFRINŮ VYSOKOÚČINNOU KAPALINOVOU CHROMATOGRAFIÍ S ELEKTROCHEMICKOU DETEKČÍ

A. VRÁNKOVÁ<sup>1</sup>, Z. JÚZOVÁ<sup>2</sup>, J. WIDIMSKÝ, JR.<sup>1</sup>, T. ZELINKA<sup>1</sup>, J. ŠKRHA<sup>1</sup>

<sup>1</sup>III. interní klinika 1. LF UK a VFN, Kateřinská 32, Praha 2, 128 08

<sup>2</sup>Laboratoř endokrinologie a metabolismu ÚKBLD a III.interní kliniky, 1. lékařská fakulta UK, Kateřinská 32, Praha 2, 128 08

Korešpondenčný autor: [alicevrankova@seznam.cz](mailto:alicevrankova@seznam.cz)

Kvantitativní stanovení katecholaminů a jejich O-methyl metabolitů, zejména metanefrinu (MN) a normetanefrinu (NMN), je užitečné v diagnostice tumoru chromafinních buněk feochromocytomu. Tento typ nádoru sekretuje katecholaminy, proto je možné zvýšenou koncentrací katecholaminů a jejich metabolických produktů v moči a v plazmě využít jako diagnostické markery tohoto typu nádoru.

Vědecké studie z poslední doby zabývající se touto problematikou, hovoří o vysoké senzitivitě testu stanovení volných metanefrinů v plazmě vzhledem k diagnóze feochromocytomu<sup>1,2</sup>.

Pro stanovení metanefrinů v plazmě metodou vysokoúčinné kapalinové chromatografie (HPLC) s elektrochemickou detekcí je zapotřebí analyty nejdříve extrahovat z plazmatické matrice. K tomuto účelu používáme SPE extrakci na ionexu. Analyty z ionexu eluujeme amoniakálním methanolem, který následně odpaříme pomocí vakuové odparky. Po odpaření elučního činidla analyty rozpustíme ve vhodném mediu a aplikujeme na kolonu HPLC s reverzní fází<sup>3</sup>.

Metoda je v současnosti validována, aby bylo možné ověřit platnost zvoleného analytického postupu. V rámci validace je určována shodnost a přesnost metody a zvolený kalibrační model.

Statisticky zpracovaná metoda s odpovídajícími parametry bude sloužit jako laboratorní kontrola pro pacienty s podezřením na feochromocytom.

*Práce vznikla za podpory grantu MSM 0021620807.*

- [1] Lenders J. W. M., Pacák K., McClellan Walther M., Linehan W. M., et al., J. Amer. Med. Assoc. 28, 1427 (2002)
- [2] Goldstein D., Eisenhofer G., Flynn J. A., Wand G., Pacák K., Hypertension 43, 907 (2004)
- [3] Lenders J. W. M., Eisenhofer G., Armando I., Keiser H., et al. Clin. Chem. 39/1, 97 (1993)

**1Po-Ut9****ELECTROCHEMICAL DNA-BASED  
BIOSENSORS WITH NANOSTRUCTURED  
SURFACE**D. ŠIMKOVÁ<sup>1</sup>, J. GALANDOVÁ<sup>2</sup>, G. ZIYATDINOVA<sup>3</sup>,  
J. LABUDA<sup>2</sup><sup>1</sup>Slovenská technická univerzita, Fakulta Chemickej a Potravinárskej  
technológie, Radlinského 9, Bratislava, 812 37<sup>2</sup>Slovenska Technická Univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a po-  
travinárskej technológie, Ústav analytickej chémie<sup>3</sup>Kazan State University, Kazan, A.M. Butlerov Institute of Chemistry,  
Analytical Chemistry DepartmentKorešpondenčný autor: *SimkovaD@gmail.com*

Simple and disposable biosensors with a layer of double stranded calf thymus and herring sperm DNA and multiwalled carbon nanotubes (MWNT) on the surface of a screen-printed carbon paste electrode (SPE) have been prepared and investigated by using cyclic voltammetry of the [Fe(CN<sub>6</sub>)]<sup>3-</sup>/[Fe(CN<sub>6</sub>)]<sup>4-</sup> redox couple. Possibilities of the detection of damage to DNA by reactive oxygen species formed in situ as well as a DNA prevention by various antioxidants were evaluated. Comparing to bare SPE, the presence of MWNT at the electrode surface significantly decreases the impedance value, as one can expect, due to the high MWNT conductivity. Impedance of the electrodes with nanostructured DNA layers is lower than that for simple SPE modified by the DNA layer only, independently of the DNA kind and modification way. Results obtained using indication of the DNA layer by cyclic voltammetry of hexacyanoferrite anion are reported and compared with those obtained by using independent measurements by electrochemical impedance spectroscopy (EIS). The methods used possess advantages at the detection of surface attached DNA, particularly indicatorless procedures and commercially available equipments and software.

*The work was supported by VEGA 1/2462/05***1Po-Ut10****ELEKTRÓN-FONÓNOVÁ INTERAKCIA  
V KOMPOZITNÝCH KOVOVÝCH  
NANOČASTICIACH**

A. GAÁL

FMFI UK

Korešpondenčný autor: *gaal@ilc.sk*

Elektrón-elektrónový a elektrón-fonónový rozptyl patria medzi ultrarábne procesy elektrónového plynu v nanočasticiach determinujúce ich fyzikálne vlastnosti [1]. Správanie elektrónov v nanočasticiach, ktoré je odlišné ako v prípade makroskopickej látky, umožňuje ich využitie v oblastiach ako rozmerovo laditeľná

fluorescencia, selektívne fotochemické reakcie, alebo pamäťové jednotky s vysokou hustotou záznamu. V tejto práci prezentujeme femtosekundové časovo rozlíšené absorpčné vyšetrenie kovových, koloidných nanočastíc, zameraním na elektrón-fonónový rozptyl.

Naše predošlé práce sa zaoberali s opisom relaxácie excitačného stavu Ag a Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> nanočastíc [2]. V prípade Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> nanočastíc boli pozorované kratšie relaxačné časy v porovnaní so Ag nanočasticami. Pozorovaná odlišnosť v súlade predstavou hustých poruchových stavov v prípade Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> nanočastíc, predstavujúce pasce excitónov. Ďalší rozdiel, dvojexponenciálny priebeh v prípade Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> nanočastíc je tiež potvrdením tohto konceptu [3]. Skúmaním Ag nanočastíc bola ukázaná rozmerová závislosť relaxačného času, keďže väčšie častice vykazovali kratšie relaxačné časy ako častice s menším priemerom. Vyšetrené nanočastice mali rozmer 10 - 30 nm a príslušné relaxačné časy boli v rozsahu 0.5 - 3 ps. Pri predpoklade silnejšieho elektrón-fonónového rozptylu na povrchu ako vo vnútri nanočastice, rozmerová závislosť súvisí zmenou pomeru povrchu k objemu častice.

Budujúc na doterajšie poznatky, boli študované absorpčné vlastnosti dvojkompozitných Co/Ag, Ag/Co, Fe/Co a Ag/Fe nanočastíc s priemerom 3 nm. Tieto nanočastice sú tvorené z jadra a plášťa (core-shell), pri hmotnostnom pomere 1:1. Statické a dynamické absorpčné spektrá kompozitných nanočastíc dávajú informáciu o vplyve ich štruktúry na elektrón-fonónový rozptyl. V prvom rade bola pozorovaná zvýšenie vplyvu elektrón-fonónového rozptylu v porovnaní s časticami v rozsahu 10-30 nm. Okrem ďalšieho zväčšenia pomeru povrchu k objemu, vplyv porúch je zosilnený aj rozhraním jadro-plášť. Na tejto báze bude diskutovaný vplyv rôznych jadier na relaxačné procesy v striebornom plášti. Získané výsledky môžu byť využité na ohodnotenie použiteľnosti viaczložkových nanočastíc vo fotochémii a pri príprave usporiadaných nanoštruktúr.

[1] M. A. El-Sayed et. al., J. Phys. Chem. B, 101, 3713-3719, 1997

[2] Bugár et. al., Femtochem and femtobio. M.M. Martin and J.T. Hynes (eds) 2004 Elsevier

[3] N. J. Cherepy, et. al., J. Phys. Chem. B, Vol. 102 (1998) 5

**1Po-Ut11****VOLTAMETRICKÉ STANOVENÍ ADRENALINU  
NA MODIFIKOVANÉ UHLÍKOVÉ PASTOVÉ  
ELEKTRODĚ**Z. JEMELKOVÁ<sup>1</sup>, J. ZIMA<sup>1</sup>, J. BAREK<sup>1</sup>, I. ŠVANCARA<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Albertov 6, CZ 12843 Praha 2

<sup>2</sup>Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Katedra analytické chemie

Korešpondenční autor: Zuzana.Jemelkova@seznam.cz

Adrenalin je hormon dřeně nadledvin. Spolu s dopaminem a noradrenalinem patří do skupiny katecholaminů. Důvodem pro analytické studie katecholaminů je jejich spojení s řadou vážných onemocnění, jako jsou např. neuroblastom vyskytující se u novorozenců, nádor dřeně nadledvin, chemodektom, nedostatek tetrahydrobiopterinu nebo dopamin-β-hydroxylázy.

K voltametričkému stanovení adrenalinu byla používána zmenšená CPE. Miniaturizace elektrody umožnila měření v 1 ml stanovovaného roztoku, čímž došlo k významnému snížení spotřeby rozpouštědel i analyzované látky. Metodou diferenční pulsní voltametrie (DPV) byly proměřeny křivky adrenalinu v koncentračním rozmezí  $1 \cdot 10^{-6}$ – $1 \cdot 10^{-5}$  mol·dm<sup>-3</sup>, limit detekce adrenalinu byl  $5 \cdot 10^{-7}$  mol·dm<sup>-3</sup>. Pro snížení mezí detekce byl adrenalin akumulován na povrch elektrody a proměřen za stejných pracovních podmínek metodou adsorpční rozpouštěcí DPV (AdS DPV). Měřením závislosti výšek píků na době a potenciálu akumulace bylo ověřeno, že se adrenalin na povrch pasty ani do jejího objemu neakumuluje.

Následně byla CPE modifikována filmem eriochromové černi T. Film byl na povrchu elektrody vytvořen vkládáním potenciálových cyklů v rozmezí -0,4 až +1,5 V v prostředí 0,01M NaOH obsahujícího 0,5mM eriochromovou čern T. Nenavázaná čern byla odstraněna vkládáním potenciálových cyklů v rozmezí -0,2 až +0,8 V v prostředí Brittonova-Robinsonova pufru. Adrenalin byl proměřen metodou DPV v koncentračním rozmezí  $8 \cdot 10^{-7}$ – $1 \cdot 10^{-5}$  mol·dm<sup>-3</sup>. Výška anodického píku adrenalinu získaného použitím modifikované CPE byla téměř třikrát větší než u čisté CPE. Limit detekce klesl na  $2 \cdot 10^{-7}$  mol·dm<sup>-3</sup>. Z výsledků měření vyplývá, že volbou správného modifikátoru může dojít k významnému snížení meze detekce.

*Tato práce byla finančně podporovaná Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy ČR (projekty č. LC 06035 a č. MSM0021620857) a Grantovou agenturou Univerzity Karlovy (projekt 34607/2007/B).*

## 1Po-Ut12

### VYUŽITÍ HOMOGENÁTU PRO STANOVENÍ AKTIVITY ENZYMŮ RUBISCO PRO DALŠÍ ANALÝZY

J. KALINA<sup>1</sup>, M. DUCIUCOVÁ<sup>1</sup>, R. BUKOVSKÁ<sup>1</sup>, O. URBAN<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Katedra fyziky, Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita v Ostravě, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava 1

<sup>2</sup>Laboratoř ekologické fyziologie rostlin, Ústav systémové biologie a

ekologie AV ČR, Poříčí 3b, 603 00 Brno

Korešpondenční autor: jiri.kalina@osu.cz

K významným fyziologickým parametrům charakterizujícím stav fotosyntetického pletiva patří obsah a aktivita enzymu Rubisco. Jedním z dalších parametrů je tzv. deepoxidační poměr (DEPS), který vyjadřuje reverzibilní přeměnu violaxantinu přes anteraxantin na zeaxantin označovanou jako xantofylový cyklus. Takovéto analýzy jsou nezbytné pro charakterizaci aklimace rostlin na nově vzniklé růstové podmínky, ke kterým patří nejen rozdílná úroveň ozářenosti, ale i např. rozdílná kultivační koncentrace CO<sub>2</sub>, o které se v poslední době hovoří hlavně v souvislosti se změnami globálních klimatických podmínek. V této práci byl využit pelet po centrifugaci homogenátu připraveného z rostlin ječmene (*Hordeum vulgare* L. cv. Bonus) pro stanovení aktivity a obsahu enzymu Rubisco nejen pro analýzu pigmentů xantofylového cyklu, ale i pro detekci karotenoidů a chlorofylů. Bezpečný pelet, který je odpadem při stanovování aktivity a obsahu enzymu Rubisco, jsme reextrahovali 80% acetonem a zeleně zbarvený supernatant jsme použili pro HPLC analýzu chlorofylů a karotenoidů. Paralelní vzorky ječmene byly následně klasicky zpracovány pro HPLC analýzu chlorofylů a karotenoidů. Pro hodnoty DEPS a poměrů pigmentů xantofylového cyklu nebyly zjištěny signifikantní rozdíly mezi metodikou využívající homogenátu enzymu Rubisco a standardní metodou extrakce pigmentů z čerstvého rostlinného materiálu. Pro hodnoty obsahů chlorofylů a karotenoidů je nutné použít korekční faktory, které byly stanoveny. Nově zavedená metodika byla aplikována v experimentech sledující krátkodobý vliv zvýšené koncentrace oxidu uhličitého na fotosyntetický aparát buku (*Fagus sylvatica* L.) a smrku (*Picea abies* [L.] Karst.) v průběhu dne. Význam námi zvoleného přístupu spočívá ve výrazné úspoře rostlinného materiálu, který bývá často limitujícím faktorem, a ve stanovení komplexnější charakteristiky daného listu.

*Tato práce byla vypracována v rámci projektu GA ČR r. č. 522/06/0930 „Změny aktivity a obsahu enzymu Rubisco při působení zvýšené koncentrace CO<sub>2</sub>“.*

**1Po-Ut13****STANOVENÍ 5-NITROCHINOLINU A 5-AMINOCINOLINU POMOCÍ PRŮTOKOVÉ INJEKČNÍ ANALÝZY S ELEKTROCHEMICKOU DETEKČÍ**

I. JIRÁNEK, J. BAREK, Z. KRÁLOVÁ, K. PECKOVÁ

*Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Albertov 6, CZ 12843 Praha 2*Korešpondenční autor: *ijirane@gmail.com*

5-nitrochinolin (5-NQ) a 5-aminochinolin (5-AQ) patří mezi látky podezřelé z karcinogenních a mutagenních účinků<sup>1</sup>. Proto je v této práci věnována pozornost stanovení 5-NQ a 5-AQ pomocí průtokové injeckční analýzy s elektrochemickou detekcí (FIA-ED). Výhodou měření v průtokovém uspořádání je snížení možnosti pasivace pracovní elektrody což přispívá k lepší opakovatelnosti měření. Bylo pracováno ve „wall jet“ uspořádání, kdy proud analyzovaného roztoku tryská na pracovní elektrodu. Jako pracovní elektroda byla použita pevná stříbrná amalgámová elektroda (AgSAE) vyvinutá v laboratoři ÚFCH JH AV ČR<sup>2</sup> modifikovaná rtuťovým meniskem (m-AgSAE) a uhlíková filmová elektroda, která byla realizována pokrytím AgSAE uhlíkovým filmem<sup>3</sup> (CF-AgSAE) vytvořeným uhlíkovým práškem rozptýleným v polystyrenu. AgSAE v porovnání s rtuťovými elektrodami vyniká robustností umožňující její použití ve spojení s průtokovými metodami. m-AgSAE si zachovává některé přednosti rtuťových elektrod, jako například dokonale hladký povrch a široké potenciálové okno v záporných potenciálech, což umožnilo její využití k detekci 5-NQ na základě jeho elektrochemické redukce. CF-AgSAE pak má vlastnosti a výhody uhlíkového materiálu, především velké potenciálové okno v anodické oblasti a je tudíž použitelná k detekci 5-AQ na základě jeho elektrochemické oxidace. V příspěvku budou diskutovány optimální podmínky pro toto stanovení (pH nosného elektrolytu, pracovní potenciál určený z hydrodynamických voltamogramů, průtoková rychlost, dávkovaný objem) a parametry stanovení (lineární dynamický rozsah, mez detekce, správnost a reprodukovatelnost, robustnost atp.).

*Tato práce byla finančně podporována Grantovou agenturou České republiky (Grant 203/07/P261) a dále Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy (projekt LC 06035 a MSM 0021620857).*

- [1] Saeki K., Murakami R., Kohara A., Shimizu N., Kawai H., Kawazoe Y., Hakura A.: *Mut. Res.-Gen. Toxic. Environ. Mutagen.* 441, 202 (1999).
- [2] Novotný L., Yosypchuk B.: *Chem. Listy* 94, 1118 (2000).
- [3] Yosypchuk B.; Berek J.; Fojta M.: *Electroanalysis* 18, 1126 (2006).

**1Po-Ut14****POROVNÁNÍ ELEKTROCHEMICKÝCH VLASTNOSTÍ KOMERČNĚ DODÁVANÝCH BOREM DOPOVANÝCH DIAMANTOVÝCH ELEKTROD**

J. MUSILOVÁ, J. BAREK, K. PECKOVÁ, V. VYSKOČIL, J. FISCHER

*Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Albertov 6, CZ 12843 Praha 2*Korešpondenční autor: *barek@natur.cuni.cz*

V posledních dvou desetiletích je v elektroanalytické chemii věnována pozornost novému elektrodovému materiálu, borem dopovanému diamantovému (BDD) polykrystalickému filmu. Mezi jeho výhodné vlastnosti patří mechanická i chemická stabilita, široké potenciálové okno, malá náchylnost k pasivaci, nízký zbytkový proud a nízká adsorpce látek na povrchu.<sup>1,2</sup> BDD filmy jsou v mnoha případech ideálním elektrodovým materiálem, který je možné použít k vysoce citlivému stanovení velkého množství organických i anorganických látek bez předchozí úpravy povrchu elektrody. BDD elektrody díky svému širokému potenciálovému oknu umožňují provádět elektrochemické reakce při potenciálech, kterých není možné dosáhnout jiným způsobem. Potenciálové okno je závislé na kvalitě filmu a nejčastěji dosahuje hodnot kolem 3,5 V.<sup>3</sup> Téměř všechny publikované elektroanalytické aplikace byly provedeny na BDD filmech nanesených na křemíku. V současné době již existuje několik dodavatelů komerčních elektrod. Tato práce se bude zabývat porovnáním elektrochemických vlastností komerčně dodávaných elektrod od firem Windsor Scientific (UK) a Adamant Technologies (Švýc.) a elektrody konstruované v naší laboratoři s BDD filmem naneseném na křemíkovém substrátu připraveným na Michiganské státní univerzitě.

*Tato práce byla finančně podporována MŠMT ČR (projekt LC06035 a MSM 0021620857) a Grantovou agenturou Univerzity Karlovy (GAUK 6107/2007/B-Ch/PrF).*

- [1] Chailapakul O., Siangproh W., Tryk D. A.: *Sens. Lett.* 4, 99 (2006).
- [2] Cvacka J., Quaiserova V., Park J., Show Y., Muck A., Swain G. M.: *Anal. Chem.* 75, 2678 (2003).
- [3] Cvačka J., Swain G. M., Berek J., Zima J.: *Chem. Listy* 96, 33 (2002).

**1Po-Ut15****BEZROZKLADOVÁ SPEKTROMETRICKÁ ANALÝZA KERAMICKÉHO MATERIÁLU SiC - POROVNANIE DC-ARC-OES A ETV-ICP-OES METÓDY**V. BOKOVÁ<sup>1</sup>, J. HASSLER<sup>2</sup>, K. FLÓRIÁN<sup>3</sup><sup>1</sup>Technická univerzita v Košiciach<sup>2</sup>ESK Ceramics GmbH & Co. KG, Max-Schaidhauf-Strasse 25, D-87437 Kempten<sup>3</sup>Technická univerzita v Košiciach, Hutnícka fakulta, Katedra chémie, Letná 9, 04200 Košice

Korešpondenčný autor: vladislava.bokova@tuke.sk

Kontaktná technika DC-ARC-OES, využívajúca ako budiaci zdroj oblúk jednosmerného prúdu, sa využíva v priemyselnej praxi pri analýze SiC na kontrolu obsahu znečisťujúcich stopových prvkov. Táto technika umožňuje analyzovať vzorky bez predchádzajúcej predúpravy, poskytuje spoľahlivé výsledky, avšak doposiaľ nebola plne automatizovaná, čo sa odráža na časovej náročnosti analýzy väčšieho množstva vzoriek. Tandemová technika ETV-ICP-OES, využívajúca elektrotermickú atomizáciu vzorky a ako budiaci zdroj indukčne viazanú plazmu, je plne automatizovateľná, poskytuje presnejšie výsledky a pri vhodných experimentálnych podmienkach tiež umožňuje bezrozkladovú analýzu keramických materiálov. V rámci vývoja vhodnej metódy na ETV-ICP-OES analýzu materiálu SiC bolo uskutočnené štatistické vyhodnotenie kalibrácie a porovnanie výsledkov s údajmi prislúchajúcimi zabehnutej technike DC-ARC-OES.

Táto práca vznikla vďaka finančnej podpore projektu DAAD 11/2005 a VEGA 1/3149/06.

**1Po-Ut16****CHEMICKÉ ZBRANĚ - KONTROLA JEJICH ZÁKAZU**

M. BLÁHOVÁ

Státní úřad pro jadernou bezpečnost

Korešpondenčný autor: marketa.blahova@sujb.cz

**1Po-Ut17****REDUKCE AMINONITROFENOLŮ NA BISMUTEM MODIFIKOVANÝCH ELEKTRODÁCH**

H. DEJMKOVÁ, J. ZIMA, J. BAREK

Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Albertov 6, CZ 12843 Praha 2

Korešpondenčný autor: hdejmkova@seznam.cz

Poslední dobou se v elektroanalýze ustupuje od používání rtuťových elektrod v obavách z možných toxických účinků rtuti. Jako jejich náhrada je zkoumána možnost využití elektrod na bázi bismutu, jehož toxicita je v porovnání se rtuťí výrazně menší, ale zachovává přitom podobné elektrochemické vlastnosti, jako je vysoké přepětí vodíku a nízké zbytkové proudy<sup>1</sup>.

Nejobvyklejší uspořádání bismutových elektrod jsou bismutové filmové elektrody (BiFE), v nichž je povlak bismutu elektrochemicky nanesen na povrch vhodné elektrody, jako je elektroda ze skelného uhlíku nebo uhlíková pastová elektroda. Jiným možným uspořádáním je nedávno představená uhlíková pastová elektroda s přimíseným bismutovým práškem (Bi-CPE), která kombinuje elektrochemické vlastnosti bismutových elektrod s výhodami uhlíkových past<sup>2</sup>. Pozornost se při používání obou typů elektrod nicméně soustředila zejména na anodickou rozpouštěcí voltometrii kovů a jen málo prací studovalo možnosti stanovení organických látek<sup>3</sup>.

Tento příspěvek se zabývá katodickou redukcí 4-amino-3-nitrofenolu na BiFE a Bi-CPE, zejména porovnáním elektrochemického chování na obou typech elektrod a na nemodifikované uhlíkové pastové elektrodě.

Tato práce byla podporována Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy ČR (projekty č. MSM 0021620857 a LC 06035) a Grantovou agenturou Univerzity Karlovy (projekt č. 34607/2007/B)

- [1] Švancara I., Vytřas K.: Chem. Listy 100, 90 (2006)
- [2] Švancara I., Baldrianová L., Tesařová E., Hočevar S.B., Elsuccary S.A.A., Economou A., Sotiropoulos S., Ogorevc B., Vytřas K.: Electroanalysis 18, 177 (2006)
- [3] Hutton E.A., Ogorevc B., Smyth M.R.: Electroanalysis 16, 1616 (2004)

**1Po-Ut18****EXTRAKCE ESTERŮ KYSELINY FTALOVÉ Z VODY POMOCÍ MAGNETICKY MODIFIKOVANÉHO PFO**M. KANDELOVÁ<sup>1</sup>, K. KOMÁREK<sup>2</sup>, M. ELCNEROVÁ<sup>1</sup>, I. ŠAFAŘÍK<sup>3</sup>, M. ŠAFAŘÍKOVÁ<sup>4</sup><sup>1</sup>Univerzita Pardubice<sup>2</sup>Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Katedra analytické chemie<sup>3</sup>Ústav systémové biologie a ekologie AV ČR, v.v.i.<sup>4</sup>Oddělení biomagnetických technik, Institut systémové biologie a ekologie AV ČR

Korešpondenčný autor: m.kandel@seznam.cz

Estery kyseliny ftalové jsou skupinou průmyslově používaných sloučenin se společnou chemickou strukturou -

dialkyl nebo alkyl/aryl estery 1,2-benzendikarboxylové kyseliny [1]. Vzhledem k tomu, že estery kyseliny ftalové jsou používány jako změkčovadla zejména při výrobě měkkých produktů z polyvinylchloridu, jsou široce rozšířené v životním prostředí [2]. V tomto abstraktu je nastíněna extrakce magnetickou tuhou fází těchto látek z modelových roztoků vody a její aplikace na reálný vzorek. Tato vsádková metoda využívá magneticky modifikované sorbenty k adsorpci organických sloučenin z vody, z nichž jsou posléze analyty eluovány pomocí organického rozpouštědla. Extrakt je dále analyzován technikou GC-FID. V této práci byla na modelových roztocích vody provedena optimalizace extrakce magneticky modifikovaným PFO, tedy optimalizace doby statické sorpce, doby statické eluce, množství elučního činidla a počet opakovaných elucí. Zjištěné výtěžnosti pro jednotlivé analyty za zoptimalizovaných podmínek jsou shrnuty v tab. 1. Za stejných podmínek byl analyzován i silně znečištěný vzorek vody z výroby dibutylftalátů, v něm byl identifikován a stanoven di-iso-butylftalát (229,47mg/l) a di-n-butylftalát(12,49 mg/l). Tyto hodnoty se shodují s hodnotami stanovenými pomocí mikroextrakce kapalnou fází.

- [1] 1. G. Latini: Clinica Chimica Acta 361 (2005) 20  
 [2] 2. I. N. Filho, C. von Muhlen, P. Schlosser, E. B. Carmao: Chemosphere 50 (2003) 657

ftalát	výtěžnost [%]	RSD [%] n=5
Di-iso-propylftalát	80,1	2,4
Di-n-propylftalát	81,6	2,8
Di-iso-butylftalát	83,1	3,2
Di-n-butylftalát	97,4	3,2
Di-n-pentylftalát	84,8	2,8
Bis-(2-ethylhexyl)ftalát	74,5	2,1
Di-n-oktylftalát	55,7	1,5

Tab. 1. Výtěžnosti extrakce jednotlivých analytů za zoptimalizovaných podmínek extrakce: čas sorpce 6 min, čas eluce 1 min, počet opakovaných elucí: 5x1ml

### 1Po-Ut19

#### VYUŽITIE TENKOVRSŤOVEJ COULOMETRICKEJ TITRÁCIE NA STANOVENIE DUSIČNANOV VO VODÁCH

S. HLÚBIKOVÁ<sup>1</sup>, Z. HANKOVÁ<sup>2</sup>, E. BEINROHR<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Slovenská technická univerzita, Fakulta Chemickej a Potravinárskej technológie, Radlinského 9, Bratislava, 812 37

<sup>2</sup>Slovenský metrologický ústav, Karloveská 63, 842 55 Bratislava

<sup>3</sup>Slovenská Technická Univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav analytickej chémie

Korešpondenčný autor: stanislava.hlubikova@stuba.sk

Voda je nepostrádateľná pre existenciu života a nedá sa ničím nahradiť. Narastajúce znečistenie povrchových vôd odpadovými a priemyselnými vodami si vynútilo vypracovanie špeciálnych metód na analýzu vôd.

Metóda tenkovrstvovej coulometrickej titrácie sa ukázala ako vhodná metóda na stanovenie dusičnanov vo vodách. Princíp metódy spočíva v elektrochemickej redukcii dusičnanov na amóniové ióny na povrchu elektrochemicky upravenej medenej elektródy. Výhodou metódy je rýchlosť, jednoduchá úprava vzoriek a možnosť priamo analyzovať zafarbené a zakalené roztoky. Hlavné validačné parametre metódy sú nasledovné: detekčný limit 0,7 mg/dm<sup>3</sup>, medza stanoviteľnosti 2,09 mg/dm<sup>3</sup>, opakovateľnosť 1,66 %, reprodukovateľnosť 6,47 %, lineárny rozsah 2,09 až 50 mg/dm<sup>3</sup>. Ako rušivé látky sa prejavili hlavne ióny chloridov, humínové látky, z povrchovo aktívnych látok to bol hyamín. Správnosť výsledkov sa potvrdila analýzou reálnych vzoriek a porovnaním výsledkov s hodnotami získanými fotometrickým stanovením.

### 1Po-Ut20

#### STUDIUM SPECIACE URANU V PROSTŘEDÍ SÍRANOVÝCH IONTŮ METODOU TRLFS

A. VETEŠNÍK<sup>1</sup>, M. SEMELOVÁ<sup>1</sup>, K. ŠTAMBERG<sup>2</sup>, E. HOMZOVÁ<sup>3</sup>, J. JOHN<sup>1</sup>, D. VOPÁLKA<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Centre for Radiochemistry and Radiation Chemistry and Department of Nuclear Chemistry, Czech Technical University in Prague

<sup>2</sup>Department of Nuclear Chemistry, Czech Technical University in Prague

<sup>3</sup>České vysoké učení technické v Praze, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská

Korešpondenčný autor: vetesnik@jfji.cvut.cz

Časově rozlišená laserem indukovaná fluorescenční spektroskopie (TRLFS - time-resolved laser-induced fluorescence spectroscopy) je moderní neinvazivní metoda umožňující studium speciace lanthanoidů a aktinoidů v nízkých koncentracích. Metoda TRLFS je citlivá a selektivní pro stanovení jednotlivých forem studovaných prvků.

V letech 2005 až 2006 byl na ČVUT v Praze, na společném pracovišti Centra pro radiační chemii a radiochemii a katedry jaderné chemie JFJI, vybudován nový systém pro metodu TRLFS. Toto zařízení se skládá z laditelného laserového systému Vibrant s optickým parametrickým oscilátorem čerpaným pulsním laserem Nd:YAG Brilliant, spektrografem Oriol MS257, ICCD kamery Andor iStar 720 a počítačem řídícím laser i ICCD kameru.

Jako modelový systém pro zavedení a ověření metodiky byl zvolen systém UO<sub>2</sub><sup>2+</sup> - SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> v prostředí chloristanu sodného. Byla změřena časově rozlišená fluorescenční spektra jednotlivých pozorovaných forem uranulu

( $\text{UO}_2^{2+}$ ,  $\text{UO}_2\text{SO}_4$ ,  $\text{UO}_2(\text{SO}_4)_2^{2-}$ ,  $\text{UO}_2(\text{SO}_4)_3^{4-}$ ). Tato spektra byla charakterizována jednak ve vlnové délce tak v čase, přičemž jednotlivé formy  $\text{UO}_2^{2+}$  byly rozlišeny podle jim charakteristických průběhů časového poklesu intenzity fluorescenčního signálu. Ze získaných závislostí zastoupení jednotlivých forem na celkové koncentraci síranů byly určeny konstanty stability jednotlivých síranových komplexů uranuly pomocí vlastního speciálního programu (STAMB 2007 - PTRLFSU1). Určené hodnoty jsou v dobrém souladu s hodnotami konstant uváděnými v databázích NEA a MINTEQ.

### 1Po-Ut21

#### VPLYV PH NA VEL'KOST' NANOČASTÍC STRIEBRA

M. HOLECOVÁ<sup>1</sup>, L. KVÍTEK<sup>2</sup>, T. NEVĚČNÁ<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta, Katedra fyzikální chemie

<sup>2</sup>Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta

<sup>3</sup>Univerzita Palackého Olomouc, Přírodovědecká fakulta, Katedra fyzikální chemie

Korešpondenční autor: mholecova@hotmail.com

Nanotechnologie představují v oblasti dalšího rozvoje výskumu a vývoja nových technologií budoucnosti jeden z najvýznamnejších smerov a už dnes sa objavujú ich prvé aplikácie v praxi. Ako typický príklad môžu slúžiť nanočastice striebra [1]. V oblastiach aplikácie je striebro značne rozšíreným kovom kvôli svojim vhodným fyzikálnym, chemickým a biologickým vlastnostiam (elektrotechnický priemysel, medicína, veda, výskum, atd.).

Príprava nanočastíc striebra redukcíou striebornej soli poskytuje množstvo možností, ako možno ovplyvniť vlastnosti vznikajúcich častíc. V systéme so vznikom komplexu striebornej soli je to, samozrejme, výber komplexotvorného činidla, redukčnej látky a ďalších faktorov (pH, modifikátory, a pod.). Pri príprave Ag nanočastíc redukcíou striebornej soli v amoniakálnom prostredí redukujúcimi cukrami (glukózou) sa ukázalo, že okrem koncentrácie amoniaku o výslednej veľkosti častíc významne rozhoduje hodnota pH reakčného systému. S rastúcim pH narastá nielen rýchlosť reakcie, ale aj veľkosť častíc. Experimenty ukázali, že od určitej hodnoty pH dochádza k skokovému nárastu priemernej veľkosti pripravených nanočastíc. Vysvetlenie spočíva v ich rýchlej agregácii. Túto agregáciu je možné vyvolať aj u už predtým pripravených častíc zalkalizovaním stabilnej disperzie, pričom hlavnú zodpovednosť za spomínanú agregáciu nesie veľmi pravdepodobne zásadná zmena zeta potenciálu častíc zo zápornej do kladnej oblasti. Mechanizmus tejto zmeny zeta potenciálu je objektom ďalších štúdií, pretože klasické

vysvetlenie (adsorpcia OH iónu) nie je v tomto prípade použiteľné.

- [1] L. Kvítek, A. Panáček, J. Soukupová, R. Zbořil: Nanotechnologie a jejich praktické aplikace, Univerzita Palackého v Olomouci, 2006

### 1Po-Ut22

#### VYUŽITÍ ANALÝZY OBRAZU, NUKLEÁRNÍ MAGNETICKÉ REZONANCE A BRDIČKOVY REAKCE PRO STUDIUM VLIVU TĚŽKÝCH KOVŮ NA EMBRYONÁLNÍ SMRKOVÉ KULTURY

J. BALOUN<sup>1</sup>, K. STEJSKAL<sup>1</sup>, V. DIOPAN<sup>1</sup>, V. SHESTIVSKA<sup>1</sup>, V. ADAM<sup>1</sup>, R. MIKELOVÁ<sup>2</sup>, J. ZEHNÁLEK<sup>1</sup>, L. HAVEL<sup>1</sup>, L. TRNKOVÁ<sup>2</sup>, K. BARTUŠEK<sup>3</sup>, R. KIZEK<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Mendelova zemědělská a lesnická univerzita v Brně, Masarykova univerzita

<sup>2</sup>Masarykova univerzita

<sup>3</sup>Ústav přístrojové techniky, Akademie věd České republiky, v.v.i.

Korešpondenční autor: kizek@sci.muni.cz

Rostliny jsou stále vystaveny biotickému i abiotickému stresu bez možnosti opustit prostředí, ve kterém se nacházejí. Proto rostlinné organismy disponují baterií různých způsobů, jak se stresem bojovat a přežít tak i v nehostinném prostředí. Pro pečlivé studium všech způsobů obrany rostlin např. proti těžkým kovům musíme mít k dispozici rozličné sledovací techniky. Hlavním cílem naší práce bylo využít multi-instrumentální analytický aparát pro studium raných somatických smrkových embryí (SRSE) ovlivněných kadmennými anebo olovnatými ionty (50, 250 a 500  $\mu\text{M}$ ) po dobu dvanácti dnů. Nejdříve jsme využili analýzu obrazu pro určení růstu a fluorimetrický senzor pro enzymatickou detekci životnosti exponovaných SRSE. Z našich získaných výsledků vyplývá, že kadmennaté ionty vykazovaly vyšší toxicitu než olovnaté. Kromě toho jsme objevili, že SRSE vystavené 500  $\mu\text{M}$  koncentraci kovů rostly lépe než embrya, které byly vystaveny působení 250  $\mu\text{M}$  iontů kovů. Pomocí nukleární magnetické rezonance jsme zjistili, že tento jev souvisí s velmi intenzivním příjmem vody, kdy se SRSE snaží bránit toxickému působení iontů kovů. Dále jsme studovali obsah glutathionu v exponovaných SRSE pomocí adsorptivní přenosové rozpouštěcí techniky ve spojení s diferenční pulsní voltmetrií Brdičkovou reakcí. Obsah redukovaného glutathionu (GSH) vzrostl na 148 ng/mg (klon 2/32) a 158 ng/mg (klon PE 14) po dvanácti dnech expozice kadmennými ionty. V případě SRSE vystavených olovnatým iontům byl obsah GSH o 150 % resp. 160 % nižší v porovnání s variantou exponovanou kadmii(II). Tento jev souvisí opět s prokazatelně vyšší toxicitou kadmenných iontů na SRSE.



Práce na tomto projektu byla podporována granty IGA MZLU 2/2007, ICHEMBIOL MSMT 0021622412 a 1M06030.

- [1] K. Bartusek Processing of MR images weighted by relaxation time T-2 to increase their contrast resolution, *Meas. Sci. Technol.* 17 (2006) 727-730.
- [2] J. Petrek, J. Vitecek, H. Vlasinova, R. Kizek, K.J. Kramer, V. Adam, B. Klejdus and L. Havel Application of computer imaging, stripping voltammetry and mass spectrometry to study the effect of lead (Pb-EDTA) on the growth and viability of early somatic embryos of Norway spruce (*Picea abies/L./Karst.*), *Anal. Bioanal. Chem.* 383 (2005) 576-586.
- [3] J. Petrlova, D. Potesil, R. Mikelova, O. Blastik, V. Adam, L. Trnkova, F. Jelen, R. Prusa, J. Kukacka and R. Kizek Attomole voltammetric determination of metallothionein, *Electrochim. Acta* 51 (2006) 5112-5119.

### 1Po-Ut23

#### POROVNÁNÍ SPEKTROFOTOMETRICKÉ A ELEKTROCHEMICKÉ METODY STANOVENÍ ENZYMU UREÁZY

O. KRYŠTOFOVÁ<sup>1</sup>, J. HRADECKÝ<sup>1</sup>, F. HLÁVKA<sup>1</sup>, J. ZEHNÁLEK<sup>1</sup>, L. HAVEL<sup>1</sup>, L. TRNKOVÁ<sup>2</sup>, R. KIZEK<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Mendelova zemědělská a lesnická univerzita v Brně, Masarykova univerzita

<sup>2</sup>Masarykova univerzita

Korešpondenční autor: kizek@sci.muni.cz

Enzym ureáza (EC 3.5.1.5, močovina amidohydroláza) je obecně rozšířeným enzymem u rostlin a je také přítomna u řady eukaryotických mikroorganismů a bakterií. Skládá z 840 aminokyselinových zbytků a molekulová hmotnost je větší než 90 kDa. Hraje klíčovou roli v katalýze rozkladu močovin za vzniku oxidu uhličitého a amoniaku. Pro stanovení aktivity enzymu byla vypracována řada přímých i nepřímých analytických metod. Nejběžnější jsou detekce amoniaku reakcí s indofenolem, stanovení  $^{14}\text{CO}_2$  a řada enzymatických reakcí spojených se spektrofotometrickým měřením oxidace NADPH. Cílem naší práce bylo porovnat spektrofotometrickou detekci ureázové aktivity prováděné pomocí Berthelotovy reakce a elektrochemickou detekci redoxních signálů ureasy a Brdičkových katalytických signálů. Princip spektrofotometrického stanovení spočívá v reakci amoniakových iontů s chlornanem sodným v prvním kroku a s fenolem v druhém kroku. Produktem reakce je indofenol, který je v kyselém prostředí žluté barvy, změnou pH do alkalické oblasti disociuje a přejde do modrého zbarvení (Berthelotova reakce), které je proměřeno při vlnové délce 636 nm. Zatímco princip Brdičkovy

reakce spočívá v detekci změn katalytických signálů poskytovaných kobaltitou solí ( $\text{Co}(\text{NH}_3)_6\text{Cl}_3$ ), která je součástí základního elektrolytu, v přítomnosti proteinu ureázy. Analýzu signálů byla prováděna pomocí adsorptivní přenosové techniky ve spojení s diferenční pulsní voltametrií. Pomocí obou analytických technik s rozličným principem detekce byla detekována ureáza izolovaná z bobu, kde byla porovnána linearita, selektivita a detekční limit. Detekční limit elektrochemické metody byl o tři řády nižší, než v případě spektrofotometrické detekce a byl roven subnanogramovým množstvím proteinu na ml vzorku. Techniky byly dále ověřeny analýzou reálných vzorků rostlin kukuřice.

Práce na tomto projektu byla podporována granty ICHEMBIOL MSMT 0021622412 a 1M06030.

- [1] V. Adam, S. Krizkova, O. Zitka, L. Trnkova, J. Petrlova, M. Beklova and R. Kizek Determination of apo-metallothionein using adsorptive transfer stripping technique in connection with differential pulse voltammetry, *Electroanalysis* 19 (2007) 339-347.
- [2] R. Kizek, L. Trnkova and E. Palecek Determination of metallothionein at the femtomole level by constant current stripping chronopotentiometry, *Anal. Chem.* 73 (2001) 4801-4807.
- [3] C.P. Witte and N. Medina-Escobar In-gel detection of urease with nitroblue tetrazolium and quantification of the enzyme from different crop plants using the indophenol reaction, *Anal. Biochem.* 290 (2001) 102-107.

### 1Po-Ut24

#### ANALYTICKÁ KALIBRÁCIA AKO SÚČASŤ OPTIMALIZÁCIE NOVEJ TANDEMOVEJ SPEKTROSKOPICKEJ METÓDY

S. RUZICKOVÁ, K. KARDOŠOVÁ

Katedra chémie, Hutnícka fakulta TU Košice, Letná 9, 042 00 Košice

Korešpondenční autor: kristina.kardosova@tuke.sk

V rámci optimalizácie novej tandemovej spektroskopickkej techniky [1], ktorá má byť prednostne využívaná pre priamu analýzu tuhých vzoriek, bola okrem optimalizácie základných experimentálnych parametrov uskutočnená aj optimalizácia analytickej kalibrácie. V analytickej praxi sa využíva niekoľko modelov kalibrácií ako: technika prídavku štandardu, modelové kalibračné vzorky, tzv. „podnikové štandardy“, monoštandardová alebo mnohoštandardová kalibrácia. Pre účely tejto práce bola uskutočnená kalibrácia pomocou modelových kalibračných vzoriek, práškovej s odstupňovanými návažkami (1-14 mg) a roztoku s odstupňovaným množstvom kalibračného roztoku (1-14  $\mu\text{l}$ ). Prášková

modelová vzorka bola tvorená zmesou oxidov vybraných prvkov (Al, B, Ca, Cr, Fe, Mg, Ni, V) o koncentracii 0,01 % v grafitickom matrici. Kalibračný roztok bol tvorený zmesou jednotlivých prvkov o koncentracii  $0,1 \mu\text{g cm}^{-3}$ . Pred samotným štúdiom kalibračných závislostí bola vykonaná prieskumová štatistická analýza jednorozmerných vstupných dát [2], ktorá vo väčšine prípadov potvrdila normálny a homogénny charakter rozloženia intenzít vybraných spektrálnych čiar a vhodnosť ich použitia pre optimalizáciu analytickej kalibrácie. Analytická priamka bola konštruovaná metódou najmenších štvorcov štatistickým softvérom QC. Expert<sup>TM</sup> 2.5 [3] a v súlade s literatúrou [4]. Pristúpilo sa ku kalibrácii so spektrochemickým prídavkom AgCl vo forme roztoku pridávaného do krátera elektród, ktorého pozitívny vplyv na efektívny ionizačný potenciál plazmy a tým aj na intenzitu budených čiar analyzovaných prvkov bol evidentný [5]. Získané výsledky potvrdili vhodnosť použitia predmetnej tandemovej techniky tak pre roztokovú analýzu ako aj analýzu tuhých vzoriek. Kalibračné priamky s úzkym pásmom dôvery, čo zaručuje vysokú presnosť koncentračného stanovenia, vykazovali linearitu v celom rozsahu. V prípade kalibrácie s odstupňovanými návažkami práškovej vzorky sa hodnoty hranice dôvery pohybovali v intervale  $c_L \in <0,45; 1,00>$  mg a koeficientu determinácie  $R \in <92; 98>$  %. Pri kalibrácii s odstupňovaným množstvom kalibračného roztoku boli získané hodnoty hranice dôkazu v rozmedzí  $c_L \in <0,020; 0,053>$   $\mu\text{g}$  a korelačný koeficient  $R \cong 98$  %.

Táto práca vznikla vďaka finančnej podpore projektov DAAD 11/2005, VEGA 1/3149/06 a APVV 20-009404.

- [1] Ružičková S., Koller L., Matherny M.: Chem. Pap. 60 (2), 116 - 121 (2006).
- [2] Ružičková S., Matherny M.: Trans. of Univ., 1, 41-45 (2006).
- [3] Kupka K.: QC. Expert<sup>TM</sup> Statistical software. TriloByte, Pardubice, 2002.

#### 1Po-Ut25

### NEW DESIGN OF FLOW - THROUGH ELECTROCHEMICAL CELL FOR ELECTROCHEMICAL HG - AAS

J. HRANÍČEK<sup>1</sup>, V. ČERVENÝ<sup>2</sup>, P. RYCHLOVSKÝ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, Albertov 2030, 128 43 Praha 2

<sup>2</sup>Charles University in Prague, Faculty of Sciences, Department of Analytical Chemistry, Albertov 2030, CZ-128 43 Prague 2

Korešpondenčný autor: hranicek.jakub@email.cz

The general aim of this work was construction of a new advanced design of flow through electrochemical cell

used for generation of volatile compounds. The main effort in construction of a new design of generation cell was to attain better hydride generation efficiency and thus to attain better sensitivity and lower detection limit of given determination. Selenium was choosing as a model analyte for all experiments.

In this work two new flow-through electrochemical cells were constructed. These new advanced generation cells come from the construction of classical thin-layer flow-through electrochemical cell, but provide large active electrode surface. As a construction material for all generation cells was selected Plexiglas for its chemical resistance, transparency and easy mechanical treatment. These two advanced types of thin-layer flow-through electrochemical generation cells have except one original cathode chamber two other parallel chambers more (fig. 1). The hydride generation runs over in separated cathode chambers connected parallel or in series. Both versions of this advanced type generation cell were different in the length (inner volume) of cathode chambers.

This project is supported by MSMT CR (project MSM 0021620857) and GAAV ČR (grant A400310507).

- [1] Šíma J., Rychlovský P.: Chem. Listy 92, 676 - 679 (1998)

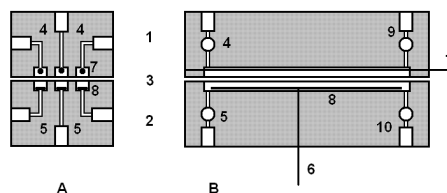


Fig. 1: Flow-through electrochemical cell 1 - cathode chamber, 2 - anode chamber, 3 - nafion membrane, 4 - catholyte inlet, 5 - anolyte inlet, 6 - Cu - contact, 7 - Pb - wire cathode, 8 - Pt - foil anode, 9 - outlet to gas-liquid separator, 10 - waste

#### 1Po-Ut26

### FLUORESCENCE DYNAMICS OF COUMARIN: SOLVATED IONS VERSUS CHARGED LAYERS

M. ŽITŇAN

Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta

Korešpondenčný autor: zitman@fns.uniba.sk

Interaction between coumarin and its environment is studied by using femtosecond time-resolved fluorescence spectroscopy. Time-resolved fluorescence spectroscopy has been already applied on host-guest supramolecular complexes, where host represents  $\beta$ -cyclodextrin

(C<sub>42</sub>H<sub>70</sub>O<sub>35</sub>) and guest represents coumarin [1,2]. A similar supramolecular host-guest inclusion complex with cyclodextrin was also tested with an attempt to form a functional supramolecular self-assembled layer [3] as a potential chemical sensor. In this contribution a system consists of coumarin C522 (C<sub>14</sub>H<sub>12</sub>F<sub>3</sub>NO<sub>2</sub>) molecule as a probe, in interaction with solvated lithium ions and dispersion containing fully delaminated layered clay mineral of montmorillonite. Coumarin has a hydrophobic character with low solubility in water and its adsorption on the montmorillonite surface is driven by the modified layer charge of montmorillonite layers. The experiment is focused on the probe dye fluorescence dynamics in solution with different content of solvated lithium ions both with dispersion containing clay mineral representing restricted environment.

*The financial supports of UK/327/2006 and APVT-20-029804 are acknowledged.*

- [1] S. Vajda, R. Jimenez, S. J. Rosenthal, V. Fidler, G. R. Fleming, E. W. Castner, *J. Chem. Soc., Faraday Trans.* 91(1995)867.
- [2] A. Douhal, T. Fiebig, M. Chachisvilis, A. H. Zewail, *J. Phys. Chem. A* 102(1998)1657.
- [3] D. Velic, G. Koehler, *Chem. Phys. Lett.* 371(2003)483.

#### 1Po-Ut27

### PRÍPRAVA A VLASTNOSTI Zn(II) KOMPLEXOV S METYLPYRIDYLKARBAMÁTOM

Z. BUJDOŠOVÁ<sup>1</sup>, K. GYORYOVA<sup>2</sup>, D. HUDECOVÁ<sup>3</sup>, J. KOVÁŘOVÁ<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Univerzita P. J. Šafárika, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Košice

<sup>2</sup>Univerzita P.J.Šafárika v Košiciach, Prírodovedecká fakulta, Moyzesova 11, Košice

<sup>3</sup>FChPT STU, Ústav biochémie, výživy a ochrany zdravia, Oddelenie biochémie a mikrobiológie

<sup>4</sup>Ústav makromolekulárnej chémie, Akademie věd České republiky, Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6

Korešpondenčný autor: gyoryova@upjs.sk

V tejto práci sú prezentované nové komplexné zlúčeniny Zn(II) so 4-chlórsalicylvou a 5-chlórsalicylvou kyselinou a metylpyridylkarbamátom. Zloženie týchto komplexov je vyjadrené všeobecným vzorcom (Cl-C<sub>6</sub>H<sub>3</sub>-2-(OH)COO<sup>-</sup>)<sub>2</sub>Zn.xL.yH<sub>2</sub>O (Cl-C<sub>6</sub>H<sub>3</sub>-2-(OH)COO<sup>-</sup> = 4-chlórsalicylan, 5-chlórsalicylan; L = metyl-3-pyridylkarbamát (mpc), x = 3; 3,5; y = 1). Pripravené komplexy boli študované spektroskopickými metódami a metódami termickej analýzy.

Z výsledkov termických meraní bolo zistené, že rozklad týchto komplexov prebieha v niekoľkých stupňoch.

V prvom stupni termického rozkladu, ktorý začína pri teplote 100°C sa u hydratovaných komplexov uvoľňuje voda a následne organický ligand, halogénsalicylvá kyselina, C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>Cl a oxid uhličitý. Konečným produktom termického rozkladu do 690°C je oxid zinočnatý.

Študovali sme aj ich biologické vlastnosti a zamerali sme sa na stanovenie antimikrobiálnej aktivity na vybraných predstaviteľoch baktérií, kvasiniek a mikroskopických mycéliových húb.

*Táto práca bola financovaná z grantu VEGA č. 1/2474/05.*

- [1] K. Győryová, J. Chomič, E. Szunyogová, L. Píknová, V. Zelenák and Z. Vargová, *J. Therm. Anal. Cal.*, 84(2006)727.
- [2] K. Győryová, J. Chomič, J. Kovářová, *J. Therm. Anal. Cal.*, 80(2005)375.

#### 1Po-Ut28

### FAST AND ACCURATE CALCULATION OF INTERMOLECULAR INTERACTION ENERGIES AND GEOMETRIES - DENSITY FUNCTIONAL THEORY AUGMENTED WITH AN EMPIRICAL DISPERSION TERM - DFT-D

P. JUREČKA<sup>1</sup>, J. ČERNÝ<sup>2</sup>, P. HOBZA<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta, Katedra fyzikální chemie

<sup>2</sup>Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, Flemingovo nám. 2, 166 10, Praha 6

<sup>3</sup>UOCHB, Flemingovo n. 2, 16610 Praha 6

Korešpondenčný autor: petr.jurecka@upol.cz

Recently it was shown that one of the major drawbacks of the current density functionals - their inability to describe the long-range dispersion interaction - can be overcome by simply adding an empirical dispersion correction to the DFT energy. With growing number of the DFT-D applications we are gradually gaining the necessary validation of the newly developed dispersion parametrization. Good accuracy was found for interaction energies of various intermolecular complexes - hydrogen bonded, dispersion bonded and complexes with mixed electrostatic-dispersion character. Geometry of more than twenty van der Waals complexes obtained with the DFT-D method agrees fairly well with the reference high-level wave function based calculations. DFT-D, though designed for the intermolecular complexes, was successfully applied also to single peptide molecules, such as phenylalanyl-glycyl-glycine, where it successfully predicted the lowest energy conformers. Also the force constants calculated with DFT-D are in fairly good agreement with the MP2 results, in some cases even improving upon the known MP2 shortcomings. Here we show

that the DFT-D method is able to predict correct geometries of one stacked and three hydrogen bonded complexes, 1,2-difluorobenzene dimer, 2-pyridone dimer, 2-pyridone.2-hydroxypyridine complex, and 2-pyridone.2-aminopyridine complex. In all four cases experimental geometries are known from microwave experiments. Although more testing may be necessary, it appears that DFT-D renders itself as a robust and reliable method joining speed advantage of DFT based methods with accuracy close to the reference wave function based calculations.

Support from the MŠMT of the Czech Republic - grant No. MSM6198959216 - is greatly acknowledged.

### 1Po-Ut29

#### VYUŽITIE CYKLICKEJ VOLTAMPÉROMETRIE PRE ŠTÚDIUM ELEKTROCHEMICKÝCH VLASTNOSTÍ FEXOFEADÍNU A TERFENADÍNU

M. VALACH<sup>1</sup>, J. KATRLÍK<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Farmaceutická Fakulta, Univerzita Komenského

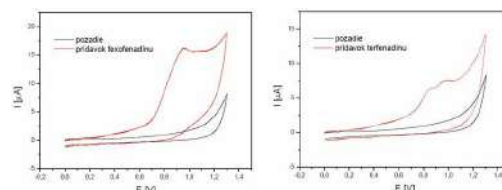
<sup>2</sup>Department of Pharmaceutical Analysis and Nuclear Pharmacy, Faculty of Pharmacy, Odbojárov 10, Comenius University, SK-832 32 Bratislava

Korešpondenčný autor: valach@fpharm.uniba.sk

Práca je venovaná vývoju metodiky pre sledovanie H1-antihistaminíkov, čiže liečiv pomáhajúcich pri alergických reakciách organizmu. Fexofenadín a terfenadín sú antihistaminiká druhej generácie, pri ktorých sú už potlačené sedatívne účinky na CNS vyskytujúce sa pri prvej generácii antihistaminíkov. Keďže fexofenadín aj terfenadín sú vo vodných roztokoch schopné oxidácie bola z hľadiska vývoja metodiky sledovania ich vlastností použitá cyklická voltampérometria, pomocou ktorej sa v praxi často sleduje priebeh oxidačno-redukčných procesov. Na začiatku bol vybraný najvhodnejší materiál pracovnej elektródy. Spomedzi testovaných (uhlík, platina a zlato) vykazovala najlepšie vlastnosti elektróda zo skleneného uhlíka. Ďalej bola na základe výsledkov merania vybraná optimálna hodnota pH fosfátového tlmivého roztoku 8,0. Počas merania bola stanovená aj najvhodnejšia hodnota rýchlosti zmeny polarizačného potenciálu 200 mV/s. Pri týchto podmienkach bol pozorovaný oxidačný pík fexofenadínu pri potenciáli +0,96 V vs. SCE a náznak druhého oxidačného píku pri potenciáli približne +1,1 V. Oxidačný pík terfenadínu pozorovaný približne pri potenciáli +0,86 V vs. SCE bol menej výrazný, druhý oxidačný pík bol pozorovaný pri potenciáli +0,99 V (Obrázok 1). Na záver sa ešte podarilo povrchovou modifikáciou pracovnej elektródy uhlíkovými nanorúrkami signifikantne zvýšiť citlivosť merania.

Táto práca vznikla s podporou grantu UK /316/2007 a projektu VEGA

1/4299/07.



Obrázok 1: Porovnanie prúdovej odozvy na prídavok 100 mg/l fexofenadínu a 10 mg/l terfenadínu nameranej pomocou cyklickej voltampérometrie pri pH 8, pri skenovacej rýchlosti 200 mV/s.

### 1Po-Ut30

#### NAKLÁDÁNÍ S PIVOVARSKÝMI ODPADY A MOŽNOST JEJICH VYUŽITÍ

T. ZOUFALÝ

Výzkumný ústav pivovarský a sladařský, a.s.

Korešpondenčný autor: zoufaly@beerresearch.cz

Při tradiční výrobě sladu a piva dochází cestou od výchozích surovin ke konečným produktům k produkovaní odpadů. V roce 2006 bylo v pivovarech České republiky vystaveno 19,787.405 hl piva. Odpady představují jednu z důležitých složek potenciálněho znečištění životního prostředí. Jejich zpracování ovšem reprezentuje progresivní způsob jejich racionálního a ekonomického využití. Míra využitelnosti odpadů závisí na úrovni aplikovaných technologií jejich využití. S výrobou nejtradičnějšího českého nápoje piva (českého typu) souvisí výroba českého sladu, a s tím pěstování sladovnického ječmene. V roce 2006 se vyrobilo 521.294 tun sladu, k čemuž bylo použito 1,280.000 tun sladovnického ječmene. Odpadní produkty sladařské a pivovarské výroby - rozdělení podle fází výrobních procesů a podle charakteru: Výroba sladu - Splavky, tj. lehká zrna, zlomky, pluchy. (U dobrých ječmenů tvoří podíl do 0,3 %. Využití - do krmných směsí). Sladový květ vzniká jako odpad při výrobě sladu a obsahuje klíčky a kořínky. (Klíčky jsou vysoce stravitelným krmivem s obsahem cca 24 % dusíkatých látek. Jsou vhodné pro krmné směsi v množství 5 - 15 %, a dále i pro alternativní výživu). Nevyužitelným odpadem je sladový prach. Výroba piva - Sladové mláto, nejčastěji jako hodnotné krmivo (balastní látky, bílkoviny, cukry, polyfenoly), ale také pokusy zpracovat jako aditivum do pekařských výrobků, nově pálení? Ze 100 kg sypání sladu se získá 110 až 120 kg vlhkého mláta. Chmelové mláto a kaly - kompostování. Výstřelková voda - opětovné využití ve varně. CO<sub>2</sub> - jímání a využití jako manipulační plyn, event. dosycování piva a výroba sycených limonád a sodovky. Odpadní filtrační materiál - křemelina

( regenerace), desky. Protlačky a dotlačky. Odstríkově pivo. Odpadní kvasnice - Pangamin, hydrolyzáty ( velké množství kyseliny glutamové), lisování odpadních kvasnic. Odpadní vody, odpadní teplo - brýdové kondenzátory, ohřev technologické vody, etikety, sklo, emise.

*Některé výsledky byly získány na základě Výzkumného záměru „Výzkum sladařských a pivovarských surovin a technologií“, identifikační kód : MSM6019369701, poskytovatel MŠMT ČR.*

- [1] Zoufalý, T.: Ověření možnosti racionálního využití pivovarských odpadů. Diplomová práce, VŠCHT, Praha, 1987.
- [2] Prokeš, J.: Parametry jakosti sladovnického ječmene sklizně 2006 ( stav k 15.9.2006), Ječmenářská ročenka 2007, VUPS, Praha, 2007.
- [3] Chrenková, M, Chrastinová, L., Čerešňáková, Z.: Nutriční hodnota zvyškov při priemyselnom spracovaní jačmeňa, Ječmenářská ročenka 2007, VUPS, Praha, 2007.

#### 1Po-Ut31

### COMPUTER AIDED PREDICTION OF LUNG MALIGNANCY

V. MRÁZOVÁ<sup>1</sup>, J. MOCÁK<sup>1</sup>, E. VARMUSOVÁ<sup>2</sup>, D. KAVKOVÁ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Univerzita sv. Cyrila a Metoda v Trnave, Fakulta prírodných vied, Katedra chémie

<sup>2</sup>Hospital for Tuberculosis and Respiratory Diseases, Department of Clinical Chemistry, Kvetnica, SK-058 87 Poprad, Slovakia

Korešpondenčný autor: [viera.mrazova@ucm.sk](mailto:viera.mrazova@ucm.sk)

The aim of this work is assessing diagnostic performance of lung tumour markers. Three clinical laboratory tests were used for indicating lung malignancy in order to verify or predict the patient's diagnosis. The data set of 182 patients was examined and two main groups of the patient samples were created - 86 with diagnosed malignancy (confirmed by histology) and 96 with diagnosed benign tumours or tuberculosis. Tumour markers were analyzed in the pleural exudate: carcinoembryonic antigen, CEA, sampled (coded EXCEA) and cytokeratin 19 fragment, CYFRA (coded EXCYF), as well as CEA in serum (SCEA). In addition, the patient's age (AGE) and gender of the corresponding individual (SEXN) were used as the fourth and fifth variable in the original data matrix. Multidimensional statistical technique of principal component analysis and cluster analysis allow display in a reduced number of dimensions the natural grouping of the samples of the individuals treated for lung diseases. Results of discriminant analysis, obtained for the training set and validation set of data, demonstrate very good possibilities of the patient classification by diagnosis. Classification performance, found by different software packages and classification methods, was very reasonable; the

best results were achieved by logistic regression (90 %). The calculated discrimination models allow a fast patient categorization to the preselected classes. The main advantage of this approach is a joint utilization of all performed individual tests in the form of their optimal linear combination relevant to the applied multivariate statistical method.

*The support of this work by the grants VEGA 1/3584/06 and APVV-20-005204 is highly acknowledged.*

- [1] Schneider J., Advances in Clinical Chemistry 2006, 42, 1-41.
- [2] Roche Diagnostics: Documentation to the tumour marker CYFRA 21-1, system ELECSYS 1010/2010. Roche Diagnostics, 1999.
- [3] Roche Diagnostics: Documentation to the tumour marker CEA, system ELECSYS 1010/2010. Roche Diagnostics, 1999.

#### 1Po-Ut32

### STUDY OF ANTITUBERCULOTIC ACTIVITY WITH LIPOPHILICITY, NMR SHIFTS AND MOLECULE PROPERTIES

T. ĎURČEKOVÁ<sup>1</sup>, P. NEMEČEK<sup>2</sup>, J. MOCÁK<sup>3</sup>, J. LEHOTAY<sup>4</sup>, K. HROBOŇOVÁ<sup>4</sup>, K. WAISSER<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Univerzita sv. Cyrila a Metoda

<sup>2</sup>University of Ss. Cyril and Methodius

<sup>3</sup>Univerzita sv. Cyrila a Metoda v Trnave, Fakulta prírodných vied, Katedra chémie

<sup>4</sup>Slovak University of Technology

<sup>5</sup>Charles University

Korešpondenčný autor: [tatiana.durcekova@ucm.sk](mailto:tatiana.durcekova@ucm.sk)

The main object of this study is quantitative structure - activity relationship (QSAR) between the biological activity of N-benzylsalicylamides and their physicochemical properties, mainly lipophilic factors log P and log k and NMR chemical shifts. Sixty six N-benzylsalicylamides, mono- or di- substituted in positions 3, 4 or 5 in the acyl moiety and in position 4 or 3,4 of the benzylic aromatic ring were synthesized. The study of antimycobacterial properties of the prepared compounds is important since they act as inhibitors of the mycobacterii growth. The search for new antimycobacterial compounds is one of the most challenging tasks of the current medicinal chemistry mainly due to their importance for tuberculosis and AIDS. All studied compounds were tested for in vitro antimycobacterial activity against following four strains - Mycobacterium tuberculosis, Mycobacterium avium, Mycobacterium kansasii and Mycobacterium kansasii clin. Their minimal inhibitive activity was determined after 14 and 21 days of incubation. Then eight basic data matrices were prepared for

four strains of mycobacterii and two incubation periods. The technique of correlation analysis was used to explore how the used properties relate each other. In several cases the relationship between biological activity and log k was more significant than that between biological activity and log P, which is more frequently used in the QSAR studies. Linear regression analysis proved that the HPLC retention factor k can substitute or complement the distribution coefficient P. In contrast to the laborious P determination, only one HPLC experiment is necessary for the log k determination.

*The research contribution of individual authors of this paper was supported by the following grants: VEGA 1/3584/06, APVT-20-005204.*

- [1] Waisser K., Peřina M., Klimeřov V., Kaustov J.: Collect. Czech. Chem. Commun. 2003, 68, 1-19.  
 [2] Waisser K., Drařkov K.: Āes. Slov. Farm. 2003, 52, 73-80.

### 1Po-Ut33

#### FULERN AKO MATRICA V HMOTNOSTNEJ SPEKTROMETRII SEKUNDRNYCH INOV

M. STUPAVSK<sup>1</sup>, M. ARANYOSIOV<sup>2</sup>, D. VELIĀ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Prrodovedeck fakulta, Univerzita Komenskho, Bratislava

<sup>2</sup>Medzinrodn laserov centrum, IlkoviĀova 3, Bratislava

KoreřpondenĀn autor: [stupavska@pobox.sk](mailto:stupavska@pobox.sk)

Hmotnostn spektrometria sekundrny inov (Secondary Ion Mass Spectrometry, SIMS) je metda na analzu chemickho zlozenia materilov. Hlavnmi prednostmi SIMS analzy s vysok citlivosť s hodnotou ař ppb a schopnosť detekcie vřetky ch prvkov. Metda je založen na bombardovan povrchu vzorky primrnmi inmi s vysokou energiou, ktor prenikaj vzorkou a dochdza k zrzkam s Āasticami vo vntri vzorky. Āasť energie sa vracia spť - dochdza k emisii Āastc z povrchu. VĀšina z tychto Āastc je nbojovo neutrlna, pre SIMS analzu s dležit tie v ionizovanej forme - sekundrne iny, ktor s analyzovne na zklade doby letu (Time of Flight, ToF). Mnořstvo sekundrny inov, ktor je vyrazen z povrchu, teda inov vt ařok, je zvisl na chemickom prostred - matrici. Matricov efekt je teda zvislosť vzniku a druhu sekundrny inov od chemickho prostredia, z ktorho s tieto iny vyrazan. Študovan je supramolekulov host - guest komplex tvoren  $\beta$  - cyklodextrnom a 1,6 - difenyl - 1,3,5 - hexatrinom. Cieľom je urĀit ako sa prejav matricov efekt, ak je komplex nanšan na kremk a na fullern, ktorm sa modifikuje chemick prostredie. Snahou je dosiahnuť tak modifikciu, ktor by zvrřila emisiu celho ionizovanho supramolekulovho komplexu. Dlřou ulhou je sledov zmenu hrbky ana-

lyzovanej vrstvy, ktor taktieř predstavuje zmenu matrice. Vplyv fullernu predstavuje pozitvnu modifikciu chemickho prostredia, dořlo k uĀinnmu zvrřeniu inovho vt ařku, vyrazeniu ionizovanho  $\beta$  - cyklodextrnu, aj dimrov. Efekt hrbky vykařuje podobn trend. So zvrřujcou sa hrbkou vrstvy analyzovanej ltky rstol aj inov vt ařok, dosiahla sa emisia celho supramolekulovho host - guest komplexu. Obidva efekty zabezpeĀili aj vrazn znizenie fragmentcie emitovny Āastc.

- [1] Frank L., Krl J., v knihe: Metody analzy povrch. str.147. Academia, Praha 2002  
 [2] Briggs D.: Surface analysis of polymers by XPS and static SIMS. Cambridge University Press 1998  
 [3] Vickermann J., Briggs D.: ToF - SIMS: Surface analysis by mass spectrometry. Charlesworth group, Huddersfield 2001

### 1Po-Ut34

#### SOUĀASN ZCHYT MDI VE FORM KATIONTU A MOLYBDENU VE FORM OXOANIONTU NA SELEKTIVNCH IONEXECH

Z. ASRESAHEGNOV<sup>1</sup>, L. JELNEK<sup>2</sup>, H. PARSCHOV<sup>2</sup>, E. MIřTOV<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vysok škola chemicko-technologick Praha

<sup>2</sup>stav Energetiky, Vysok škola chemicko-technologick v Praze, Technick 5, 16628 Praha 6

KoreřpondenĀn autor: [paluchovazuzana@seznam.cz](mailto:paluchovazuzana@seznam.cz)

Mď i molybden jsou pro lidsk organismus esencilnmi prvky. Ovřem jejich nadmrn koncentrace mže psobit problmy.

Nadmrn obsah mdi ve vod vyvolv nepřijemn svravou chuť. Je limit pro pitnou vodu je 0,1 mg/l, pro povrchovou 0,05 mg/l (kvli je toxicit pro ryby a dalř vodn organismy).

Molybden je ve vtřch koncentracch toxick (molybdenosa). Limit pro vodrensk vody Āin 0,05 mg/l, pro ostatn povrchov vody 0,2 mg/l. Koncentrace Mo nen limitovna v pitn, kojeneck a stoln vod.

Sorpce kov byla sledovna pomoc dynamicky kolonovy zkouřek, kter probhaly na třech typech sorbent za tchto podmnek: objem ionex - 15 ml, specifick zatizen -  $6 V/V_0$ , vstupn koncentrace kařdho kovu - 10 mg/l, tř typy vstupnho pH: 3,5; 4 a 4,5, vřechny ionexy byly v protonizovan form.

Prvn sorbent - Purolite D4123 (styren-vinyl benzenov matrice a 1-deoxy-1-methyl-amino-D-glucitolov funkĀn skupina) mď nesorbaval ani při jednom z mřeny pH (3,5; 4; 4,5). Ale velk užitkov kapacita D4123 pro molybden (0,82 mol/l při pH = 3,5) byla

využita pro vznik směsného lože ionexů Purolite D4123 a Lewatit E 304/88 (obsahující tetraethylenaminovou funkční skupinu) v objemovém poměru 1:1. Protože na této směsi měď nebyla zachytávána, byla vytvořena druhá směs Purolite D4123 a Lewatit TP207 (obsahující iminodiacetátovou funkční skupinu). V tomto případě byla sorpce úspěšná ve všech třech případech vstupního pH. Nejlepší užitková kapacita pro měď i molybden byla naměřena při pH=3,5. Pro měď činila 0,367 mol/l a pro molybden 0,366 mol/l.

Další obdobné pokusy jsou plánovány s využitím pikoly-laminových sorbentů pro sorpci mědi.

*Tato práce vznikla za podpory Výzkumného záměru MSM CZ 6046137304.*

- [1] Ruzzová P.: Doktorská disertační práce-Polyoxydroxopolymery pro selektivní sorpci oxoaniontů, VŠCHT Praha 2003
- [2] Kozák J.: Doktorská disertační práce-Selektivní sorpce těžkých kovů, VŠCHT Praha 2001
- [3] Matějka Z., Parschová H., Ruzzová P., Jelínek L., Houserová P., Mištová E., Beneš M. a Hrubý M.: Selective uptake and separation of (Mo, V, W, Ge) - Oxoanions by Synthetic Sorbents having Polyol-Moieties and by Polysaccharide-based Biosorbents, in Fundamentals and Applications of Anion Separations, (Eds. Bruce A. Moyer and Raj P. Singh), Chapter 15, 249-261 ACS, Kluwer Publ. House, 2004

### 1Po-Ut35

#### SIMS CHARACTERIZATION OF HYDROFOBIZED AND CARBONIZED ZEOLITES

J. OSLANSKÁ<sup>1</sup>, M. ARANYOSIOVÁ<sup>2</sup>, E. CHMIELEWSKA<sup>3</sup>, D. VELIČ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Bratislava

<sup>2</sup>Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, Bratislava

<sup>3</sup>Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava

Korešpondenčný autor: [jana.oslanska@gmail.com](mailto:jana.oslanska@gmail.com)

Zeolites are porous aluminosilicate solids with well defined structure. The shape-selective properties of zeolites are the basis for their use in molecular adsorption. Zeolites technologically contribute to a cleaner and safer environment in several ways [1, 2].

The experiment was performed on hydrofobized and carbonized zeolites. The hydrofobized zeolite was prepared by adsorption of octadecylamine (ODA) on natural zeolite clinoptilolite surface. The carbonized zeolite was

prepared by thermal pyrolysis. The technique SIMS for surface analysis was used. In SIMS, the surface of the sample is bombardment by high energy ions. The ejected species may include atoms, clusters of atoms and molecular fragments. These are accelerated into the analyzer with an equal energy but different velocities depending on the particle mass [3]. Mass spectra, two dimensional images and depth profile were measured. Si<sup>+</sup>, Al<sup>+</sup>, Li<sup>+</sup>, K<sup>+</sup>, Na<sup>+</sup>, Mg<sup>+</sup>, Ca<sup>+</sup> as the ions of the elements of the basic zeolite structure, hydrophobic molecular ions C<sub>18</sub>H<sub>40</sub>N<sup>+</sup> (m/z = 270,3) and its fragments C<sub>18</sub>H<sub>38</sub>N<sup>+</sup>, C<sub>16</sub>H<sub>36</sub>N<sup>+</sup>, NH<sub>4</sub><sup>+</sup>, C<sub>17</sub>H<sub>39</sub>N<sub>2</sub><sup>+</sup> were identified in the mass spectrum of hydrophobic zeolite. Intensity of hydrophobic molecular ions of C<sub>18</sub>H<sub>40</sub>N<sup>+</sup> and its fragments C<sub>18</sub>H<sub>38</sub>N<sup>+</sup>, C<sub>16</sub>H<sub>36</sub>N<sup>+</sup>, NH<sub>4</sub><sup>+</sup> decreased in the mass spectrum of carbonized zeolite with increasing temperatures. In the mass spectrum of carbonized zeolite, the small organic fragments C<sub>4</sub>H<sub>5</sub><sup>+</sup>, C<sub>3</sub>H<sub>7</sub><sup>+</sup>, C<sub>4</sub>H<sub>7</sub><sup>+</sup> were also present, as formed in process of carbonization.

In the depth profile a composition change occurred at the time of 12 000 sec. This point defined a transition from the carbonized layer to zeolite substrate.

Due to these modifications, selective and sorption properties of zeolites have been also changed. This experiment is a base for surface and spatial analysis of modified zeolites.

- [1] BOWMAN R. S., HUNTER D. B., SULLIVAN E. J., 1997 Clays and Clay Min., 45, 42
- [2] VOLTOLINI M., ARTIOLI G., MORGET M., 2003 Microp. Mesop. Mat., 61, 79
- [3] BRIGGS D., 1998, Surface analysis of polymers by XPS and static SIMS, Cambridge Press

### 1Po-Ut36

#### A NEW MODEL FOR CONTROLLING THE ENZYMATIC HYDROLYSIS FOR PRODUCING SURROGATES ON THE BASIS OF BARLEY AND OTHER GRAINS

T. ZOUFALÝ<sup>1</sup>, P. BRYNYCH<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Výzkumný ústav pivovarský a sladařský, a.s.

<sup>2</sup>Ing Petr Brynych Beer Consulting

Korešpondenčný autor: [zoufaly@beerresearch.cz](mailto:zoufaly@beerresearch.cz)

Research Institute of Brewing and Malting Plc Prague has worked on developing and developed a method for producing grain hydrolysate, which is primarily used for use as a surrogate in brewing. The main method was controlling the enzymatic hydrolysis of starch and other macromolecular barley (wheat) components for producing the hydrolysate and its concentrate. At the start the research was realised under laboratory conditions (16 experiments), the developmental work was further carried

out on semi-operational equipment (13 hydrolyses). Enzyme preparations - hydrolases (the most important being amylases and proteases) - were selected for the model controlled hydrolyses. After completing the hydrolysis of barley (wheat) in the semi-operational reactor and separating out the solid component of the barley (wheat), the settlings were separated on a rotary centrifuge and the hydrolysate was thickened in a vacuum evaporator. Beer was made from selected experimental parts of the barley hydrolysates. Analytical parameters of the barley used: moisture 11.5 % by original mass, starch content 67 % by original mass, proteins 11.0 % mass in solids. Mechanical composition of the groats: predominant fraction had particles larger than 1.270 mm, the next fraction with a particle size between 0.574 to 1.000 mm. A mix of groats and water in a weight ratio of 1 part groats to 6 parts water. Mash infusion with temperature lags corresponding to the optimum temperature of the pertinent enzymes. Following rotational centrifugation the hydrolysates were thickened in a vacuum evaporator to a solids concentration of 65 % by mass. Currently the breweries are interested in using sugar syrups - hydrolysates. This is accompanied by growing demands on the qualitative parameters of the hydrolysates or their concentrates, mainly from the standpoint of the required mono- and oligosaccharides. In contrast to the available sugar syrups in which glucose predominates considerably the authors, through the control of the enzymatic hydrolysis, optimised the maltose and glucose ratio, which is similar in the hydrolysate as it is in the usual wort (for selected hydrolysates the maltose content was 65.3, i.e. 63.3 mg/ml, glucose content was 36.2, i.e. 26.8 mg/ml). Due to its usage in brewing attention was paid to the alpha-nitrogen content in the hydrolysates during the controlled hydrolysis. The attenuations achieved, 87.4 %, 84.4 %, and 85.3 %, are favourable. The wheat hydrolysate demonstrated an alpha-amino nitrogen content of 129.7 mg/l.

*Some of the results used were obtained in the framework of project no. QF3297 from the Czech Ministry of Agriculture. and with the support of Research intention MSM6019369701 from the Czech Ministry of Education.*

- [1] Štancl, J., Zoufalý, T. et al.: Řízená enzymatická hydrolyza škrobu a dalších makromolekulových komponent ječmene (obilovin) pro výrobu koncentráту a jeho následné průmyslové využití. Závěrečná zpráva k projektu č. QF3297 Mze ČR, VUPP a VUPS, Praha 2005.
- [2] Brynych, P., Zoufalý, T.: Ječmenný hydrolyzát nové generace pro výrobu piva, 33. Pivovarsko-sladařský seminář, Plzeň 18.-19.10.2006.

### 1Po-Ut37

#### APPLICATION OF THE SINGLE-STEP APPROXIMATION

P. ŠIMON

FCHPT STU Bratislava

Korešpondenčný autor: peter.simon@stuba.sk

Mechanisms of processes in condensed phase are very often unknown or too complicated to be characterised by a simple kinetic model. They tend to occur in multiple steps that have different rates. To describe their kinetics, methods based on the single-step approximation are often used, either the model-free or model-fitting ones. The most important feature of these methods is the additivity. Consequences of the additivity on the treatment of kinetic data and reliability of predictions are analyzed. Use of the Arrhenius and non-Arrhenius temperature functions is tested.

## Postery – sekcia 2

### 2Po-Ut1

#### MONOPEROXOKOMPLEXY VANÁDU(V) S BIOLOGICKY VÝZNAMNÝMI O A N DONOROVÝMI LIGANDAMI.

S. PACIGOVÁ<sup>1</sup>, M. SIVÁK<sup>2</sup>, R. GYEPES<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra anorganickej chémie

<sup>2</sup> Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta

<sup>3</sup> Karlova Univerzita v Prahe, Prírodovedecká fakulta

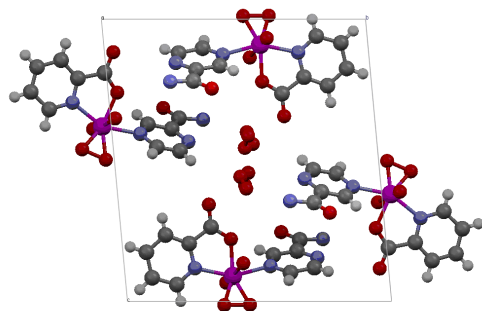
Korešpondenčný autor: pacigova@fns.uniba.sk

Z reakčného systému  $V_2O_5-H_2O_2-L-H_2O-S$  [L: kyselina pikolínová (*pic*), pyrazínamid (*pcaa*) alebo pikolínamid (*pa*), S je acetonitril pre (1) a izopropylalkohol pre (2)] boli izolované dva neutrálne monoperoxokomplexy zloženia:  $[VO(O_2)(pcaa)(pic)(H_2O)] \cdot H_2O$  (1) a  $[VO(O_2)(pic)(pa)] \cdot H_2O$  (2). RTG štruktúrna analýza potvrdila, že koordinačným polyédrom vanádu v štruktúre 1 a 2 je pentagonálna bipyramída. Molekulová štruktúra komplexu 1 je ojedinelá tým, že sa na vanád popri bidentátnej ligande koordinuje jeden anorganický a jeden organický monodentátne ligand (*akva* a *pcaa*). V štruktúre 1 je zaujímavá aj prítomnosť 1D kanálov v strede základnej bunky v smere pozdĺž osi *a* (obr.), v ktorých sa nachádzajú neusporiadané molekuly kryštálovej vody. Supramolekulovú architektúru komplexov 1 a 2, popri klasických vodíkových väzbách, tvoria aj C-H...O väzby a  $\pi-\pi$  interakcie medzi aromatickými kruhmi *pic* a *pa* ligandov. <sup>51</sup>V NMR spektrum komplexu 1 po rozpustení vo vode vykazuje štyri chemické



posuny (ppm,  $I_{rel}$ ): - 544,8 (4,85 %), - 603,1 (86,93 %), - 634,6 (6,54 %) a - 696 ppm (1,68 %).

*Autori d'akujú grantovej agentúre VEGA za finančnú podporu, s ktorou práca vznikla (Projekt VEGA 1/4462/07) a Univerzite Komenského (Grant UK/172/2007).*



cathodes (W, Mo). The reactive cathodes (Cu, Ni) allowed the lanthanum deposition with depolarization.

*Acknowledgments. This work was supported by Science and Technology Assistance Agency under the contract No. APVT-20-000204*

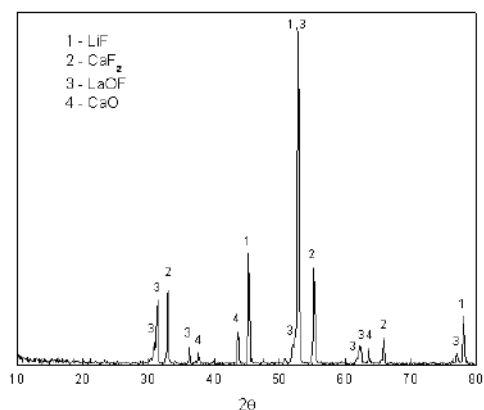


Fig.1 XRD record of the quenched sample of the system (LiF — CaF<sub>2</sub>) — La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

## 2Po-Ut2

### ELECTROCHEMICAL BEHAVIOUR OF THE SYSTEM LiF — (CaF<sub>2</sub>) — La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

J. JURIŠOVÁ, M. AMBROVÁ, V. DANIELIK

*Slovenská Technická Univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov*

Korešpondenčný autor: [jana.jurisoa@stuba.sk](mailto:jana.jurisoa@stuba.sk)

The long-term hazard of radioactive waste arising from nuclear energy production could be reduced by the use of partitioning and transmutation of actinides and long-lived fission products. One of the main difficulties in recovery of actinides is their separation from the lanthanides due to their similar chemical properties. Constituents forming spent fuel can be separated on the basis of their different physical and/or electrochemical properties. Electrolysis of molten salt can be one of the alternatives to separate metals from spent nuclear fuel.

This work is a part of a project dealing with electroseparation of the constituents forming the MOX (mixed oxide) spent nuclear fuel. Lanthanum compounds in the fluoride melts were chosen as a modelling system.

The electrochemical behaviour of the systems LiF — La<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and LiF — CaF<sub>2</sub> — La<sub>2</sub>O<sub>3</sub> was investigated by the means of cyclic voltammetry. Several types of working electrodes (spectrographic pure graphite, W, Mo, Ni, Cu) were used.

It was found that chemical reactions take part in the system during dissolution of lanthanum oxide (Fig.1). The reduction of Li<sup>+</sup> cations occurred at the most positive potential from the species formed in the melt on “inert”

## 2Po-Ut3

### INTERKALACE FYLOSILIKÁTU CHELATONEM A JEHO SORPČNÍ VLASTNOSTI

J. SEIDLEROVÁ<sup>1</sup>, M. VALÁŠKOVÁ<sup>2</sup>, M. NOVÁČKOVÁ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vysoká škola báňská - Technická univerzita Ostrava

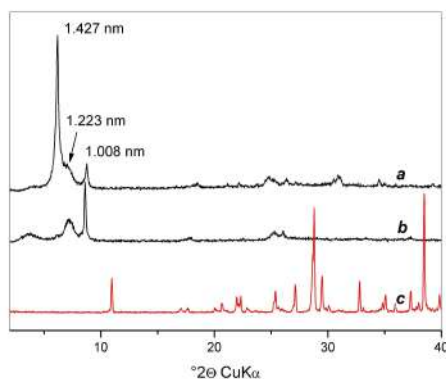
<sup>2</sup>VŠB - TUO

Korešpondenčný autor: [jana.seidlerova@vsb.cz](mailto:jana.seidlerova@vsb.cz)

Fylosilikáty jsou zajímavými materiály, které lze využít pro sorpce anorganických i organických polutantů. Jejich vrstevnatá struktura umožňuje interkalaci různými organickými molekulami, v důsledku čeho se mění jejich původní vlastnosti. Lze předpokládat, že interkalovaný fylosilát chelaton III bude ve struktuře vázat prvky, které mohou vytvářet cheláty a být tak pevně vázány ve struktuře fylosilikátu.

Do struktury vermikulitu byl Chelaton III interkalován v roztoku při teplotě 80 °C. Interkalace byla dokázána rtg. difrakcí (viz obrázky). Sorpční vlastnosti původního i interkalovaného vermikulitu byly ověřeny sorpčí Zn z vodného roztoku. Koncentrace Zn se sledovala atomovou absorpční spektroskopií s plamenovou atomizací. Interkalovaný vermikulit nevykazoval výrazně větší sorpční schopnosti Zn ve srovnání s původním materiálem. Elektronovou mikroskopií byla dokázána přítomnost Zn i na povrchu interkalovaného vermikulitu.

*Autoři děkují MŠMT za poskytnuté prostředky na řešení projektu číslo GAČR 205/05/2548, v rámci kterého práce vznikla.*



a - interkalovaný fylosilikát, b - vstupný fylosilikát, c - chelaton III

## 2Po-Ut4

### MONTMORILLONITE MODIFIED WITH SILVER: PREPARATION AND TESTING OF ANTIBACTERIAL ACTIVITY.

P. PRAUS<sup>1</sup>, K. MALACHOVÁ<sup>2</sup>, M. TURICOVÁ<sup>1</sup>, Z. PAVLÍČKOVÁ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vysoká škola báňská - Technická univerzita Ostrava

<sup>2</sup>Department of Biology and Ecology, University of Ostrava, Dvořákova 7, 701 03 Ostrava

Korešpondenčný autor: petr.praus@vsb.cz

Na<sup>+</sup>-rich montmorillonite (MMT) type Wyoming (CEC=0.7 meq/g) was saturated with Ag<sup>+</sup> at concentrations of up to 40 mmol/l. The Langmuir isotherm was statistically confirmed as the best fitting model of the adsorption data. Therefore the monolayer adsorption of Ag<sup>+</sup> on the MMT surface can be supposed. Part of Ag<sup>+</sup> was intercalated into the MMT interlayer space as demonstrated by the XRD patterns. Specific surface area (SSA) of natural MMT and Ag-modified MMT was measured by the BET method. SSA of MMT-Ag was found to be higher than that of MMT. The calculations of micropore (the Horvath Kawazoe method) and mesopore (the JBH method) size distributions revealed that new micropores and mesopores were created on MMT-Ag and thus its SSA increased.

The MMT-Ag samples were reduced by sodium borohydride to obtain MMT containing metallic Ag (MMT-Ag-red). Both MMT-Ag and MMT-Ag-red were used for testing of their antibacterial activity on *Escherichia coli* bacteria. By means of absorbance measurements at 625 nm and counting of colonies on the agar plates only MMT-Ag was found to be effective antibacterial material. Its antibacterial effects are attributed to the action of desorbed Ag<sup>+</sup> through ion exchange with Na<sup>+</sup> coming from nutrient broth solutions.

The authors thank Mrs. S. Študentová and Dr. M. Valášková (both from

VSB-TU Ostrava) for the SSA, pore size distribution and XRD patterns measurements. This work was supported by the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (MSM 6198910016).

## 2Po-Ut5

### ABLACE A LEPTÁNÍ POLYMERŮ MODIFIKOVANÝCH PLASMOU

J. SIEGEL, A. ŘEZNÍČKOVÁ, R. KALOUSKOVÁ, P. SLEPIČKA, V. ŠVORČÍK

Vysoká škola chemicko-technologická Praha

Korešpondenčný autor: jakub.siegel@vscht.cz

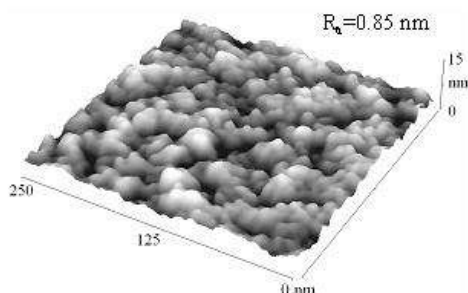
Modifikace polymerů plasmatickým výbojem je zajímavá zejména pro svou jednoduchost, snadnou implementaci do výrobního procesu, spolehlivost, ekologičnost a cenovou dostupnost [1]. Modifikace ovlivňuje polymerní povrchovou vrstvu o tloušťce ca desítek až několika stovek nanometrů. To znamená, že takto modifikované polymery si zachovávají své objemové vlastnosti. Při expozici polymerů v plasmě dochází k čtyřem hlavním povrchovým dějům, k čištění, k ablaci a leptání, k síťování a modifikaci chemické struktury polymerů [2,3].

V této práci jsme studovali modifikaci polymerů (HDPE, LDPE, PET, PTFE a PS) Ar plasmou a následné leptání exponovaných polymerů ve vodě. Cílem bylo stanovit zejména tloušťku ablatovaných a vodou odleptaných vrstev a popsat chemické a morfologické změny probíhající na povrchu polymerů. Modifikované polymery byly analyzovány spektroskopii UV-VIS, mikroskopii atomárních sil (AFM) a úbytky vrstev v důsledku ablaci a leptání ve vodě byly studovány mikrogravimetricky.

Modifikace se projevuje zejména vznikem nových chemických skupin, síťováním a větvením makromolekul a přítomností nízkomolekulárních oxidovaných struktur v povrchové vrstvě modifikovaného polymeru. Současně dochází k nárůstu drsnosti, smáčivosti a změně morfologie povrchu polymeru.

Tato práce vznikla za podpory vnitřního grantu VŠCHT v Praze č. 126080016, GA AVČR v projektu č. KAN400480701 a grantu MŠMT ČR č. LC 06041.

- [1] C. Wang, X.C.Liu, J.R.Chen, et al., Surface modification of polytetrafluoroethylene film by Ar remote-plasma, Basic Science Journal of Textile Universities 17 (2004) 351
- [2] V. Švorčík, J. Siegel, P. Slepíčka, V. Kotál, J. Švorčíková and M. Špírková, Surf. Interface Anal., 39 (2007) 79
- [3] Václav Švorčík, Vladimír Kotál, Petr Slepíčka, Jakub Siegel, Petr Sajdl, Anna Macková, Vladimír Hnatowicz, Polym. Degrad. Stabil., zasláno



AFM snímek 240 s modifikovaného poly(ethyltereftalátu)

## 2Po-Ut6

### VLASTNOSTI SMĚSNÝCH KRYSTALŮ

A. HOVORKOVA<sup>1</sup>, D. BACHAN<sup>2</sup>, Č. DRAŠAR<sup>2</sup>, A. KREJČOVÁ<sup>2</sup>, P. LOŠŤÁK<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická

<sup>2</sup>Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice

Korešpondenčný autor: [aneta.hovorkova@student.upce.cz](mailto:aneta.hovorkova@student.upce.cz)

Tellurid a selenid bizmutitý patří mezi polovodiče tetradymitové struktury. Jejich vlastnosti jsou určeny přítomností přirozených poruch (vakance po selenu, resp. po telluru,  $V_{Te}$ ,  $V_{Se}$  a antistrukturní poruchy atomů bismutu na místech atomů telluru  $Bi_{Te}$ ,  $Bi_{Se}$ ) v krystalové struktuře, které se tvoří v důsledku nadstechiometrického obsahu bismutu. Přítomnost uvedených poruch často ovlivňuje změny vlastností vyvolaných zabudováním cizích atomů do krystalu  $Bi_2Te_3$ , resp.  $Bi_2Se_3$ .

Směsné krystaly  $Bi_2Te_{3-x}Se_x$ , nacházejí uplatnění v Peltierových chladicích elementech, pracujících v oblasti teplot 300K. Přes velkou pozornost, která je v literatuře věnována studiu vlastností uvedených směsných krystalů, nejsou k dispozici údaje o změnách fyzikálních vlastností v řadě krystalů  $Bi_2Te_{3-x}Se_x$  v oblasti malých koncentrací selenu, tedy v oblasti ve které mohou být změny fyzikálních vlastností ovlivněny přítomností přirozených poruch. Cílem předkládané práce bylo proto připravit krystaly  $Bi_2Te_{3-x}Se_x$  s nízkým obsahem selenu a na základě měření změny transportních koeficientů s rostoucím obsahem Se ve vzorcích vyšetřit, zda změny těchto parametrů nejsou ovlivňovány přítomností přirozených poruch.

Bridgmannovou metodou byly připraveny monokrystaly  $Bi_2Te_{3-x}Se_x$  s koncentrací selenu ( $c_{Se} = 0 - 12,6 \times 10^{20} \text{ atomů.cm}^{-3}$ ; obsah selenu byl stanoven atomovou absorpční spektroskopií). Vzorky krystalů byly charakterizovány měřením Hallova koeficientu  $R_H$  a elektrické vodivosti  $\sigma$ . Bylo zjištěno, že s rostoucím obsahem selenu nejprve dochází k poklesu hodnot  $R_H$ ,

v oblasti vyšších obsahů se hodnota  $R_H$  naopak zvyšuje, závislost

$R_H = f(c_{Se})$  vykazuje při  $c_{Se} \approx 4,3 \times 10^{19} \text{ atomů.cm}^{-3}$  minimum. Tento průběh je vysvětlen interakcí nenabitých substitučních poruch atomů Se na místech po atomech Te ( $Se_{Te}$ ) s přirozenými poruchami krystalové struktury. Tento výsledek je podpořen také extrémem pozorovaným v závislosti  $\sigma = f(c_{Se})$ .

Tato práce vznikla za finanční podpory Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR v rámci projektu MSM 0021627501.

## 2Po-Ut7

### KINETIKA FOTOINDUKOVANÝCH ZMĚN V TENKÝCH VRSTVÁCH AMORFNÍCH CHALKOGENIDŮ

A. FIŠEROVÁ

Univerzita Pardubice

Korešpondenčný autor: [alena.fiserova@seznam.cz](mailto:alena.fiserova@seznam.cz)

KINETIKA FOTOINDUKOVANÝCH ZMĚN V TENKÝCH VRSTVÁCH AMORFNÍCH CHALKOGENIDŮ ALENA FIŠEROVÁ, MIROSLAV VLČEK Katedra obecné a anorganické chemie, Univerzita Pardubice, 532 10 Pardubice [alena.fiserova@seznam.cz](mailto:alena.fiserova@seznam.cz) V této práci byla studována kinetika fotoindukovaných změn v tenkých vrstevkách amorfních chalkogenidů na bázi As-S, Ge-S, Ge-As-S, Ge-In-S a Ge-Ga-S. Objemové vzorky byly připraveny přímou syntézou z prvků polovodičové čistoty a z nich byly získány tenké vrstvy metodou vakuového napařování. Tloušťka těchto vrstev se pohybovala od 300 do 1000 nm. Tyto vrstvy byly exponovány jak polychromatickým zářením halogenové lampy na vzduchu přes IR cut off filtr ( $I = 10 \text{ mW/cm}^2$ ), tak monochromatickým zářením Ar laseru (514 nm,  $I = 800 \text{ mW/cm}^2$ ). Bylo zjištěno, že při expozici Ar laserem i halogenovou lampou dochází v tenkých vrstevkách k posunu krátkovlnné absorpční hrany (KAH) jak k vyšším, tak k nižším vlnovým délkám (proces fototmavnutí a fotosvětlení) v závislosti na složení vrstev. Kinetiky těchto fotoindukovaných změn lze popsat rovnicemi 1.řádu. Tyto změny byly funkcí jak doby expozice, tak intenzity záření daného zdroje. Fototmavnutí a fotosvětlení vrstev indukované expozicí jak Ar laserem tak halogenovou lampou bylo provázáno změnou hodnoty optické šířky zakázaného pásu Egopt a současně změnou velikosti indexu lomu. Z našich výsledků je patrné, že expozice Ar laserem indukuje výrazný posun KAH zejména u systémů na bázi Ge. Na proti tomu při expozici halogenovou lampou byla zjištěna vyšší fotocitlivost pro systémy na bázi As.

Práce byla provedena za finanční podpory projektu MŠMT ČR VZ

0021627501

**2Po-Ut8****VYSOKOTEPLTNÁ NEUTRÓNOVÁ  
PRÁŠKOVÁ DIFRAKČIA SÚSTAVY  
Na<sub>3</sub>AlF<sub>6</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>**

M. KUCHARÍK

Ústav anorganickej chémie SAV, Bratislava

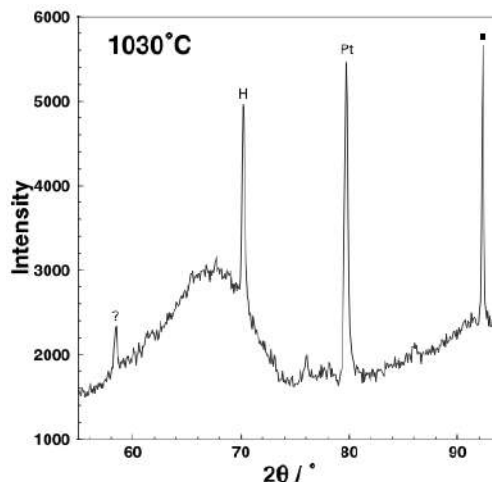
Korešpondenčný autor: uachkuch@savba.sk

V dnešnej dobe sa hliník vyrába iba Hall-Héroltovým procesom, ktorého princípom je elektrolýza oxidu hlinitého rozpusteného v kryolitovej tavenine [1]. Svoju úlohu, hlavne z vedeckého hľadiska a v menšej miere aj z technologického, zohráva znalosť “štruktúry” roz-taveného elektrolytu. Stanovená štruktúra elektrolytu po-tom môže poskytnúť informácie, na ktorých budú za-ložené ďalšie úvahy a merania charakterizujúce mecha-nizmus samotného elektrochemického procesu vylučova-nia hliníka [2]. Stanovenie štruktúry kryolitových tavenín sa stretáva s veľkými problémami, ktoré vyplývajú zo samotných vlastností tavenín, ako je vysoká teplota tope-nia a vysoká reaktivita. Vysokoteplotné spektrálne tech-niky (HT Raman, HT NMR), merania fyzikálnochemick-ých vlastností a termodynamické modelovania naznačujú, že v kryolitových taveninách s oxidom hlinitým budú vznikáť tzv. oxofluorohlinitanové komplexné anióny [3]. Už dlhodobo sa vedie polemika o existencii ox-ofluorohlinitanových zlúčenín aj v tuhej fáze. Existencia v tuhej fáze by mohla potvrdiť existenciu oxofluo-rohlinitanov aj v kvapalnej fáze. Práca bola zameraná na *in situ* merania neutrónových difrakčných práškových záznamov pri vysokých teplotách. Veľkou výhodou neu-trónovej práškovej difrakcie je, že sa analyzuje celý ob-jem vzorky. Pracovalo sa v oblasti teplôt od 700 °C do 1250 °C. Získané výsledky poukazujú na kryštalizáciu oxidu hlinitého z taveniny. Preto sa môže vylúčiť exis-tencia kryštalickej formy oxofluorohlinitanových zlúčenín v tuhej fáze v oblasti vysokých teplôt. Na obr. 1 je neutrónový difrakčný záznam nameraný pri teplote 1030 °C. Podľa fázového diagramu sústavy Na<sub>3</sub>AlF<sub>6</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> je systém pri danom zložení a teplote 1030 °C v oblasti koexistencie tuhej a kvapalnej fázy. V zázname je jasne pozorovaná silná difrakcia patriaca  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (korund).

Ďakujem za podporu grantovým agentúram VEGA 7077 a APVT 08104.

- [1] Dewing, E. W., Canadian Metallurgical Quarterly, 13(4), 607-618 (1974).
- [2] Grjotheim, K., Krohn, C., Malinovský, M., Matišovský, K., and Thonstad, J., Aluminium Electrolysis, Fundamentals of the Hall-Héroult Process, 2nd ed., Aluminium-Verlag, Düsseldorf, Germany, 1982.

- [3] Thonstad, J., Fellner, P., Haarberg, G. M., Híveš, J., Kvande, H., Sterten, Å., Aluminium Electrolysis, Fundamentals of the Hall-Héroult Process, 3rd ed., Aluminium-Verlag, Düsseldorf, Germany, 2001.



Neutrónový práškový difrakčný záznam sústavy Na<sub>3</sub>AlF<sub>6</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> pri t= 1030 °C.

**2Po-Ut9****ODSTRAŇOVÁNÍ OXIDŮ DUSÍKU  
ABSORPČNÍMI METODAMI**

L. HORA

Výzkumný ústav anorganické chemie, a.s. Ústí nad Labem

Korešpondenčný autor: lukas.hora@vuanch.cz

Oxidy dusíku (NO<sub>x</sub>) jsou jednou ze složek, které se významně podílí na znečištění životního prostředí. Hlavním zdrojem NO<sub>x</sub> jsou především spalovací procesy, které tvoří cca 90 % celkových emisí. Z toho na dopravu připadá více než 50 %, zbytek tvoří spalování paliv pro výrobu elektrické energie a tepla. Chemické výroby jsou zastoupeny v celkové emisi NO<sub>x</sub> velmi malou měrou, avšak často se jedná o zdroje s proměnlivou a především o několik řádů vyšší koncentrací NO<sub>x</sub> než u zdrojů ostatních. Jedním ze tří tematických okruhů námi řešeného projektu je odstraňování zbytkových NO<sub>x</sub> vznikajících při výrobě dusitanu amonného ve Spolaně a. s. Neratovice, v dílčí výrobně provozu Kaprolaktam. NO<sub>x</sub> jsou absorbovány do roztoku siřičitanu a hydrogensiřičitanu amonného. Produkty absorpce jsou dusík a síran amonný. Absorpce probíhá ve válcové koloně s výplní z Raschigových kroužků. Důležitým faktorem ovlivňujícím absorpci je zejména poměr NO/NO<sub>2</sub>, který je závislý mimo jiné na obsahu kyslíku v plynu. Čím více NO<sub>2</sub> plyn obsahuje, tím se zvyšuje účinnost absorpce. Vyšší obsah kyslíku pozitivně ovlivňuje obsah NO<sub>2</sub> oxidací NO, na druhé straně způsobuje rychlejší

úbytek absorpčného činidla oxidací siřičitanu. V rámci projektu byla navržena a postavena laboratorní modelová aparatura umožňující testovat absorpci NO<sub>x</sub> do roztoku siřičitanů v širokém rozsahu parametrů. Aparatura umožňuje připravovat plyn o různé koncentraci NO<sub>x</sub>, kyslíku i poměru NO/NO<sub>2</sub>. Poměr NO/NO<sub>2</sub> je nastavován dobou zdržení směsi NO se vzduchem v oxidátoru při zvolené teplotě. Absorpční činidlo tvoří upravený roztok hydrogensířičitanu amonného vyráběný ve Spolaně. Je plánováno, že vyčerpaný absorpční roztok bude zpracováván v některé z dalších částí výroby kaprolaktamu.

*Tento projekt je řešen s finanční podporou Ministerstva průmyslu a obchodu České republiky, evidenční číslo projektu je FT-TA3/075. Autoři za finanční podporu děkují.*

## 2Po-Ut10

### CHARACTERIZATION AND DIFFERENTIATION OF KAOLINS FROM SELECTED CZECH DEPOSITS USING INFRARED SPECTROSCOPY AND THERMAL ANALYSIS

L. VACULÍKOVÁ, E. PLEVOVÁ

*Ústav geoniky AV ČR, v.v.i.*

Korešpondenční autor: [vaculikova@ugn.cas.cz](mailto:vaculikova@ugn.cas.cz)

The physico-chemical properties of kaolinites are strongly dependent on the degree of structural disorder or "crystallinity". Infrared spectroscopy with thermal analysis (TG/DTA) were used to examine the structure order of the kaolinite samples from selected Czech deposits. In infrared spectra of kaolinites the structural disorder is detectable mainly in the OH stretching region, although some general broadening of all bands may also occur [1],[2]. On the basis of change in the relative intensities of absorption bands corresponding to the stretching and bending vibrations of structural OH groups, it was possible to divide analyzed samples into three groups: with well ordered structure, ordered structure and very poorly ordered structure. The measured DTA curves showed the endothermic and exothermic reactions in a kaolinite samples, such as desorption of surface water (external - surface and interlayer H<sub>2</sub>O) at low temperature (cca 100°C) and dehydration and dehydroxilation (internal-surface H<sub>2</sub>O and structural OH groups) at higher temperature (cca 550-570°C). The polymorphic transformation to mullite and cristobalite observed as the exothermic effect at about 980-1000°C was depended on crystallinity of selected kaolinites. The additional kinetics parameters also corresponded well with the degree of structural disorder. The obtained results from infrared spectra and TG/DTA curves of kaolinite samples were compared with previously published XRD data [3].

**Key words:** kaolinite, infrared spectroscopy, thermal

analysis (TG/DTA).

*The work was supported by Research plan No. AVOZ 30860518.*

- [1] Russell, J.D., Fraser, A.R.: (1994) Infrared methods. In: Clay Mineralogy: Spectroscopic and Chemical Determinative Determinative Methods, Ed. M.J. Wilson, 18-21.
- [2] Madejova J., Kraus I., Tunega D., Samajova E.: (1997) Geologica Carpathica - Clays. Vol. 6, No. 1, 3-10.
- [3] Chmielova, M., Weiss, Z.: (2002) Applied Clay Science. 22, 65-74.

## 2Po-Ut11

### OXOVANADIČNANY S KOMPLEXNÝMI KATIÓNMÍ

L. KLIŠTINCOVÁ<sup>1</sup>, P. SCHWENDT<sup>2</sup>, E. RAKOVSKÝ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Bratislava*

<sup>2</sup>*Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra anorganickej chémie*

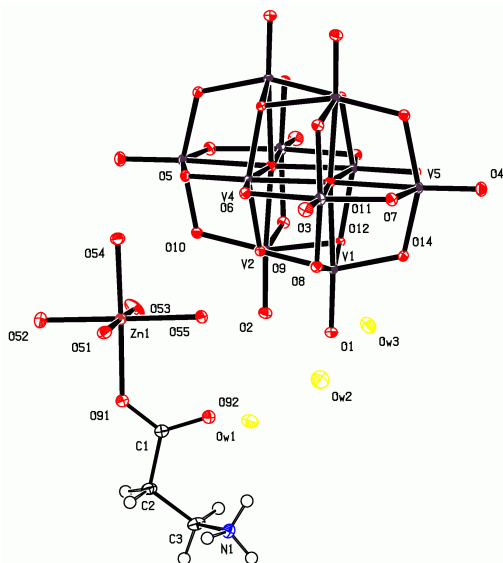
Korešpondenční autor: [klistincova@fns.uniba.sk](mailto:klistincova@fns.uniba.sk)

Z reakčného systému b-alanín - ZnSO<sub>4</sub>·7H<sub>2</sub>O - NH<sub>4</sub>VO<sub>3</sub> - voda - etanol bola izolovaná nová hybridná anorganicko-organická zlúčenina : (NH<sub>4</sub>)<sub>2</sub>[Zn(H<sub>2</sub>O)<sub>5</sub>(NH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>COO)]<sub>2</sub>

H<sub>2</sub>V<sub>10</sub>O<sub>28</sub>·3H<sub>2</sub>O (**1**). Príprava tejto látky vyžaduje presné nastavenie reakčných podmienok, najmä pH, teploty kryštalizácie a vzájomného pomeru látkových množstiev reaktantov.

Zlúčenina **1** bola charakterizovaná elementárnou analýzou, IČ spektroskopiou a RTG štruktúrnou analýzou. Štruktúra **1** je tvorená izolovanou katiónovou a aniónovou časťou. Katión predstavuje oktaedrický komplex zinku, pričom sa na centrálny atóm koordinuje päť molekúl vody a monodentátne jedna molekula b-alanínu. Na dekanadičnanový skelet sú viazané dva protóny.

*Táto práca vznikla s finančnou podporou MŠ SR (grant VEGA 1/4462/07) a Univerzity Komenského (grant UK/173/2007).*



Obr. 1: Štruktúra 1

**2Po-Ut12****MOŽNOSTI OVLIVNĚNÍ VELIKOSTI A DISTRIBUCE PÓRŮ A JEJICH VLIV NA VLASTNOSTI**

V. BARTŮNĚK, O. SMRČKOVÁ

Vysoká škola chemicko-technologická Praha

Korešpondenční autor: vilem.bartunek@vscht.cz

V této práci byl zkoumán vliv pórovitosti na supravodivé vlastnosti vysokoteplotních objemových supravodičů Bi(Pb)-Sr-Ca-Cu-O. Vzorky byly připraveny standardní metodou reakce v pevné fázi. Více porézní materiál byl připraven přidáním nekalcinovaného podílu do směsi před sintrací, méně porézní materiál byl připraven opakovanou sintrací vzorků. Bylo zjištěno, že vzorky s většími póry měly nižší proudové hustoty než vzorky s oblastí pórů posunutou k nižším poloměrům. Kritické teploty všech vzorků se neměnily. Také fázové složení určené RTG fázovou analýzou nevykazovalo u jednotlivých vzorků rozdíly postačující k vysvětlení změn kritických proudových hustot. Tato zjištění jsou užitečná při technických aplikacích vysokoteplotních supravodičů a také při budoucím vývoji speciálních kompozitních materiálů.

**2Po-Ut13****PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE MOLEKULÁRNÍCH HLINITOFOSFONÁTŮ**

J. CHYBA, M. NEČAS, Z. MORAVEC, J. PINKAS

Masarykova univerzita, Přírodovědecká fakulta, Ústav chemie

Korešpondenční autor: jpinkas@chemi.muni.cz

Syntéza nových hybridních anorganicko-organických materiálů je jednou z rychle se rozvíjejících oblastí výzkumu moderní anorganické a materiálové chemie [1]. Naším cílem je příprava materiálů obsahujících ve své struktuře hlinitofosfonátové molekulární stavební jednotky [2]. Jejich spojením pomocí vhodných organických bifunkčních sloučenin (linkerů) bychom chtěli dosáhnout vzniku systémů se sít'ovou strukturou a permanentní porozitou.

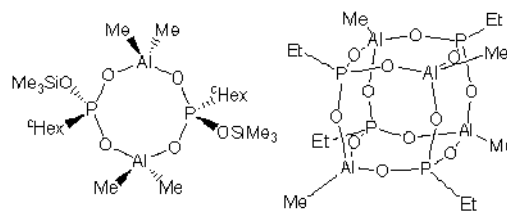
V počáteční fázi našeho výzkumu jsme se zaměřili na syntézu molekulárních hlinitofosfonátových prekurzorů. Za tímto účelem jsme provedli nehydrolytické kondenzační reakce vybraných fosfonových kyselin a jejich esterů s organohliníty sloučeninami. Optimalizovanými dealkylačními a dealkylsilylačními [3] postupy se nám podařilo připravit dimerní cyklické a tetramerní kubické sloučeniny. Připravené molekulární hlinitofosfonáty jsme charakterizovali spektroskopickými a fyzikálně-chemickými metodami a následně studovali možnosti substituce organických skupin u těchto systémů.

Tato práce byla finančně podporovaná MSM0021622410.

[1] Spíchal, Z.; Nečas M.; Pinkas, J. Inorg. Chem. 2005, 2074

[2] Kratochvíl, J.; Nečas, M.; Petříček, V.; Pinkas, J. Inorg. Chem. 2006, 6562

[3] Pinkas, J.; Löbl, J.; Nečas, M. In 11th International Symposium on Inorganic Ring Systems, Finland, 2006, 25



Hlinitofosfonátové molekulární stavební jednotky

**2Po-Ut14****VYUŽITÍ METOD SOL-GEL PŘI PŘÍPRAVĚ SUPRAVODIČŮ Bi(Pb)-Sr-Ca-Cu-O**

E. MÁJOVÁ, D. SÝKOROVÁ, O. SMRČKOVÁ, K. RUBEŠOVÁ

Vysoká škola chemicko-technologická Praha

Korešpondenční autor: Dagmar.Sykorova@vscht.cz

Pro praktické využití vysokoteplotních supravodičů jsou vedle dostatečně vysoké kritické teploty (cena chladicího média) důležité jejich transportní vlastnosti (proudová hustota). Protože se jedná o keramický oxidový materiál,



jsou tyto vlastnosti významně závislé na mikrostruktuře supravodiče.

Vzorky nominálního složení  $\text{Bi}_{1,6}\text{Pb}_{0,4}\text{Sr}_2\text{Ca}_{2,5}\text{Cu}_{3,5}\text{O}_x$  byly připraveny kombinovaným postupem, tj. různými metodami sol-gel s následnou reakcí v pevné fázi. Vlastnosti takto připravených vzorků byly srovnány s vlastnostmi vzorků získaných standardní reakcí v pevné fázi. Užití metod sol-gel v počáteční fázi přípravy zvyšuje homogenitu směsi, podporuje kinetiku tvorby fáze Bi-2223 ( $T_c = 110 \text{ K}$ ) a tak umožňuje zkrátit dobu kalcinace a sintrace. Tyto vzorky mají v porovnání se vzorky připravenými standardní reakcí v pevné fázi lepší mikrostrukturu (kontakt mezi zrny) a tudíž i vyšší hodnoty kritické proudové hustoty.

*Tato práce byla podporována grantem GAČR 203/05/0114 a VZ MŠMT 60461373/02.*

- [1] Kakihana M., Journal of Sol-Gel Science and Technology 6, 7-55 (1966)
- [2] Garnier V., Caillard R., Sotelo A., Desgardin G., Physica C 319, 197-208 (1999)

## 2Po-Ut15

### ŠTVORCOVOPLANÁRNE DITHIOLÁTOVÉ KOMPLEXY Ni(II) S N-DONOROVÝMI BIDENTÁTNÝMI LIGANDAMI

P. HERICH<sup>1</sup>, J. KAMENÍČEK<sup>2</sup>

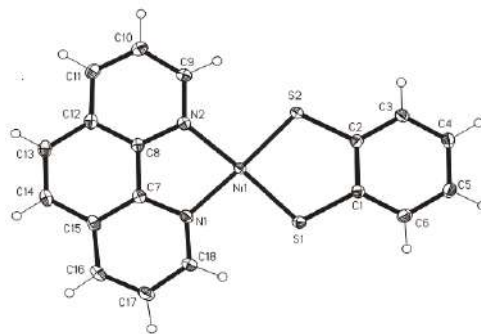
<sup>1</sup>Přírodovědecká fakulta, UP Olomouc, Katedra anorganické chemie

<sup>2</sup>Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, Křížkovského 10, 771 47 Olomouc

Korešpondenčný autor: peter.herich@post.sk

Bola pripravená séria štvorcovoplanárnych komplexov typu  $[\text{Ni}(\text{N,N})(\text{S,S})]$ , kde N,N-ligandy sú (bpy = 2,2' bipyridin, phen = 1,10 phenanthrolin, nphen = 5-nitro-1,10 phenanthrolin a S,S ligandy sú (bdt = benzen-1,2-dithiol, tdt = 1-toluen-3,4-dithiol, mnt = maleonitrildithiol) [1,2]. Tieto komplexy boli charakterizované pomocou elementárnej analýzy, infračervenou a elektrónovou spektroskopiou, magnetochemickými a vodivostnými meraniami. Monokryštálovou rentgenoštruktúrnou analýzou komplexu  $[\text{Ni}(\text{phen})(\text{bdt})]$  bola potvrdená štvorcovoplanárna geometria chromoforu  $\text{NiN}_2\text{S}_2$ .

- [1] R. Pastorek, J. Kameníček, M. Pavlíček, J. Husárek, Z. Šindelář and Z. Žák, J. Coord. Chem. 55 (2002), 1301
- [2] T. M. Cocker and R. E. Bachman, Inorg. Chem. 40, (2001), 1550



Molekulová štruktúra látky  $[\text{Ni}(\text{phen})(\text{bdt})]$ . Termálne elipsoidy sú znázornené s 50% pravdepodobnosťou.

## 2Po-Ut16

### STUDIUM SLOUČENIN TYPU $\text{LnAlSn}_{2-x}\text{Cr}_2\text{O}_7$

L. VÁLEK

Katedra anorganické technológie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10, Pardubice

Korešpondenčný autor: lukasvalek@email.cz

Mezi speciální anorganické pigmenty patří sloučeniny s pyrochlorovou strukturou odvozené od Neapolské žluti ( $\text{Pb}_2\text{Sb}_2\text{O}_7$ ). Tento žlutý pigment je ovšem ekologicky závadný díky obsahu olova s antimonu, které je třeba nahradit jinými prvky - ekologicky příznivými, se kterými by sloučeniny s touto strukturou vykazovaly zajímavé barevné vlastnosti a vysokou chemickou a termickou stabilitu.

Sloučeniny typu  $\text{LnAlSn}_{2-x}\text{Cr}_2\text{O}_7$  byly připraveny klasickým suchým způsobem. Reakční směsi byly kalcinovány v elektrické peci (KO II, VEB Elektroband Frankehausen, SRN) při teplotách 1300, 1400 a 1500 °C po dobu 1 hodiny. Připravené sloučeniny byly rozetřeny v porcelánové třecí misce s tloučkem. Po aplikaci do organického pojiva a keramické glazury byly objektivně změřeny hodnoty barevných souřadnic  $L^*$ ,  $a^*$ ,  $b^*$  na přístroji ColorQuest XE (HunterLab, USA).

Dále byly u připravených sloučenin sledovány také velikosti pigmentových částic a k prokázání přítomnosti požadované struktury byla použita rentgenová difrakční analýza (difraktometr D8 Advance, Bruker AXS, VB).

*Tento výzkum je podporován Grantovou agenturou ČR (104/05/2081).*

**2Po-Ut17****ZLOŽENIE A REDOX STAV HISTORICKÝCH SKIEL**

A. PLŠKO<sup>1</sup>, J. ŠULCOVÁ<sup>2</sup>, L. BARILLOVÁ<sup>1</sup>, D. STAŠŠÍKOVÁ<sup>3</sup>, M. BIELICH<sup>3</sup>, M. SAMUEL<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Faculty of Industrial Technologies, University of Alexander Dubček in Trenčín, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov*

<sup>2</sup>*Fakulta priemyselných technológií TnUAD, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov*

<sup>3</sup>*Archeological Department SAV Nitra, Slovakia*

Korešpondenčný autor: *plsko@fpt.tuni.sk*

Skúmalo sa šesť vzoriek segmentovaných sklenených korálikov zo 4. až 10. storočia z lokalít na Slovensku okrem jednej, ktorá bola z lokality v Rakúsku. Na základe zisteného chemického zloženia je možné skúmané sklá priradiť do sústav  $\text{Na}_2\text{O}-\text{CaO}-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{SiO}_2$ ,  $\text{Na}_2\text{O}-\text{K}_2\text{O}-\text{CaO}-\text{MgO}-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{SiO}_2$ , kde  $\text{CaO} > \text{MgO}$ , a  $\text{Na}_2\text{O}-\text{K}_2\text{O}-\text{CaO}-\text{MgO}-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{SiO}_2$ , kde  $\text{CaO} < \text{MgO}$ , z čoho je možné robiť závery o použitých surovinách a aj o geografickom pôvode skúmaných skiel. Určili sme aj redox stav skúmaných skiel, ktorý nám dáva informácie jednak o spôsobe tavenia, ale aj prítomnosti redukujúcich resp. oxidujúcich látok v sklárskom kmeni, z ktorého sa tavilo príslušné sklo. Na základe získaných výsledkov môžeme povedať, že tavenie historických skiel prebiehalo za redukčných podmienok, a že farbiaci oxid, v našom prípade CuO, bol vnášaný do sklárskeho kmeňa v silne redukujúcej forme.

**2Po-Ut18****ŠTÚDIUM TEPLOTNÝCH ZMIEN PÓROVITEJ ŠTRUKTÚRY  $\text{SiO}_2$ -AEROGÉLU**

K. JESENÁK<sup>1</sup>, M. VARGOVÁ<sup>2</sup>, O. ŠAUŠA<sup>3</sup>, V. MAJERNÍK<sup>3</sup>, J. KRIŠTIÁK<sup>3</sup>, P. HUDEC<sup>4</sup>

<sup>1</sup>*Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta*

<sup>2</sup>*Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra anorganickej chémie*

<sup>3</sup>*Slovenská akadémia vied v Bratislave, Fyzikálny ústav*

<sup>4</sup>*Slovenská technická univerzita, Fakulta Chemickej a Potravinárskej technológie, Radlinského 9, Bratislava, 812 37*

Korešpondenčný autor: *jesenak@fns.uniba.sk*

$\text{SiO}_2$ -aerogél je vysokopórovitá látka patriaca do skupiny anorganických aerogélov. Okrem tradičných použití tejto látky v oblasti organickej katalýzy a termoizolačných materiálov, je mimoriadne perspektívne jeho využitie v elektronike, kde hlavným trendom je snaha o vytváranie vrstiev s nízkym indexom lomu a fluorescenčnými vlastnosťami. Pretože väčšina vlastností tejto látky je priamym dôsledkom špecifickej pórovitej štruktúry, je distribúcia pórov základnou charakteristikou tejto látky. Predkladaná práca konfrontuje výsledky rôznych metódik stanovenia distribúcie pórov pri vysokoteplotnom ohreve

aerogélu s výsledkami pozitronovej anihilačnej spektroskopie (PAS). Ako štandardné metodiky boli použité ortuťová porozimetria, sorpcia  $\text{N}_2$  a skenovacia elektrónová mikroskopia.  $\text{SiO}_2$ -aerogél (hustota:  $0,2 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ) bol pripravený hydrolyzou roztoku tetrametoxysilánu (TMOS) v metanole<sup>1</sup>. Aerogél sa získal vysokoteplotným superkritickým sušením alkogélu pri teplote  $270 \text{ }^\circ\text{C}$  a tlaku 12 MPa. Hlavným záverom práce je konštatovanie, že pri ohreve  $\text{SiO}_2$ -aerogélu nad  $400 \text{ }^\circ\text{C}$  sa prednostne znižujú póry s primárnou veľkosťou nad 20 nm, pričom táto zmena má plynulý charakter až do teploty cca  $900 \text{ }^\circ\text{C}$ . Naopak póry s priemerom do 15 nm si zachovávajú takmer stabilnú veľkosť až do teploty cca  $800 \text{ }^\circ\text{C}$ ; nad touto teplotou dochádza k výraznému znižovaniu pórov a ich zánik sa pozoruje pri teplote  $1200 \text{ }^\circ\text{C}$ .

*Táto práca bola realizovaná za podpory Agentúry na podporu vedy a techniky SR*

*(projekt č. APVT-20-0011804).*

- [1] 1. Jesenák K., Kubínek R., Kuchta L., Fajnor V.: *J. Thermal Anal. Cal.*, 67, No. 1, 207, 2002.

**2Po-Ut19****ROUBOVÁNÍ POLYMERNÍCH FILMŮ POMOCÍ PLASMY**

K. KOLÁŘOVÁ<sup>1</sup>, V. ŠVORČÍK<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*VŠCHT Praha*

<sup>2</sup>*Vysoká škola chemicko-technologická Praha*

Korešpondenčný autor: *kolarova@vscht.cz*

Díky velké variabilitě a dobré dostupnosti jsou v medicínské praxi stále více využívány polymerní materiály. Jejich nejširší použití je jako zdravotnický pomocný materiál (např. obaly, obvazy, infúzní sety), nosný materiál pro růst a přenos buněk a jako implantáty. U materiálů používaných pro tyto účely má zásadní význam vzájemná interakce mezi povrchem materiálu a buňkami, které na něm rostou. Materiál poskytuje mechanickou stabilitu a buněčná složka vytváří novou tkáň díky extracelulární matrix. Tato interakce je velmi složitá a komplexní mechanismus, který ještě nebyl plně objasněn. Pro podpoření či naopak potlačení buněčné adheze a růstu se povrch materiálu modifikuje. Jedním ze způsobů modifikace je expozice polymerního filmu v plasmě a následné roubování chemických sloučenin z roztoku. Fyzikálně chemické změny na povrchu modifikovaného materiálu jsem studovala pomocí goniometrie, mikroskopie atomárních sil (AFM), Rutherfordova zpětného rozptylu (RBS) a infračervené spektroskopie.

*Tato práce byla vypracována za podpory GA CR projekt číslo. 204/06/0225, GAAS CR Projekt KAN400480701 a A 5011301 a MSMT číslo. LC 06041.*



**2Po-Ut20****INTERAKCE VSMC S MODIFIKOVANÝM PE**

N. KASÁLKOVÁ<sup>1</sup>, K. KOLÁŘOVÁ<sup>1</sup>, L. BAČÁKOVÁ<sup>2</sup>,  
M. PAŘÍZEK<sup>2</sup>, V. ŠVORČÍK<sup>3</sup>

<sup>1</sup>VŠCHT Praha

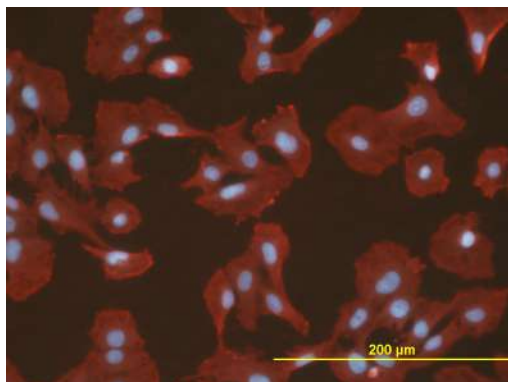
<sup>2</sup>Fyzikální ústav AV ČR, v. v. i.

<sup>3</sup>Vysoká škola chemicko-technologická Praha

Korešpondenční autor: kasalkon@vscht.cz

Byly studovány fyzikálně-chemické a biologické vlastnosti polyethylenu (PE) a modifikovaného PE. PE folie byla modifikována po dobu 0 - 400s plasmatickým výbojem a roubována aminokyselinou. Změny v povrchové morfologii PE byly studovány goniometrií a Rutherford Back Scattering (RBS). Biologické vlastnosti (adheze a proliferace hladkých svalových buněk z aorty) byly studovány za podmínek in vitro (obr.). Bylo zjištěno, že s rostoucí dobou působení plasmového výboje klesá úhel smáčení (roste polarita) povrchu polymeru. Z testů in vitro bylo patrné, že modifikace v plasmě zvyšuje homogenitu adherujících buněk a následné roubování aminokyselinami zvyšuje proliferaci buněk.

Tato práce byla vypracována za podpory GA ČR projekt č. 204/06/0225, GAAS ČR projekty č. KAN400480701 a A 5011301 a Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR č. MSM 6046137302 a ICT v Praze č. 126080017.



Adheze VSMC na modifikovaném PE

**2Po-Ut21****ADSORPCE TOXICKÝCH OXOANIONTŮ Se(IV) A Se(VI) NA MODIFIKOVANÉ JÍLY**

L. HERZOGOVÁ<sup>1</sup>, B. DOUŠOVÁ<sup>1</sup>, D. KOLOUŠEK<sup>1</sup>,  
M. NOVOTNÁ<sup>2</sup>, L. FUITOVA<sup>1</sup>

<sup>1</sup>VŠCHT Praha, Ústav chemie pevných látek, Technická 5, 166 28 Praha 6

<sup>2</sup>VŠCHT Praha, Laboratoř molekulové spektroskopie, Technická 5, 166 28 Praha 6

Korešpondenční autor: Lenka.Herzogova@vscht.cz

Jílové minerály patří mezi látky s vysokými specifickými povrchy a sorpčními kapacitami. Z tohoto důvodu jsou v přírodních a technologických procesech žádanými sorbenty. Díky jejich poměrně nízkému bodu nulového náboje se jejich povrchy chovají spíše jako katexy. Jejich modifikací ionty železa, hliníku nebo manganu lze zvýšit jejich body nulového náboje a tedy i možnost zachycení adsorbátů aniontového charakteru. Tento příspěvek podává výsledky úpravy vzorků kaolinů, které se lišily zastoupením základních fází, a následné adsorpce toxických oxoaniontů Se(IV) a Se(VI) z vodných roztoků. Bylo zjištěno, že sorpční proces oxoaniontu Se(IV) probíhá efektivně na kaolinech modifikovaných všemi uvažovanými ionty. Jako perspektivní úprava kaolinů pro sorpci Se(VI) se jeví modifikace ionty Al(III). Účinnost těchto sorpcí je až 99 %. Sledováním změny koncentrace Se v roztoku v závislosti na čase bylo zjištěno, že při úpravě kaolinů ionty Al(III) je postačující pro sorpci doba 3 h, při úpravě ionty Fe(III) 24 h a ionty Fe(II) a Mn(II) je účinnější sorpční experiment prodloužit na 72 h. Efektivnost adsorpce těchto aniontů je ovlivňována složením původního materiálu, pH a koncentrací výchozího roztoku Se či zvolenou dobou pro ustanovení rovnováhy. Velkou roli hraje zřejmě způsob vazby oxoaniontů na povrch adsorbentu.

Práce byla podpořena VZ MŠMT ČR č. 6046137302 a projektem GA AVČR č.A401250701.

- [1] Edwards M., Benjamin M. M., 1989. Adsorptive filtration using coated sand: a new approach for treatment of metal-bearing wastes, *Journal of WPCF*, 61: 1523-1533.
- [2] Wen-Hui Kuan, Shang-Lien Lo, Ming K. Wang, Cheng-Fang Lin, 1989. Removal of Se(IV) a Se(VI) from water by aluminium-oxide-coated sand, *Wat. Res.*, 32: 915-923.

**2Po-Ut22****Ru(III)-COMPLEXES INVOLVING BENZYL-DISUBSTITUTED DERIVATIVES OF 6-BENZYLAMINOPURINE.**

K. ŠTEPÁNKOVÁ, M. MATIKOVÁ-MALÁROVÁ, Z. TRÁVNÍČEK  
*Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta*

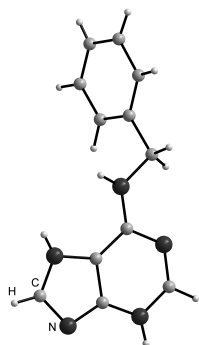
Korešpondenční autor: Kamila.Stepankova@seznam.cz

Many ruthenium-based compounds have been investigated up to now. Among them, a few show interesting biological properties, e.g. [indH][trans-Ru<sup>III</sup>(ind)<sub>2</sub>Cl<sub>4</sub>] (called KP1019), and [ImH][trans-Ru<sup>III</sup>Cl<sub>4</sub>(DMSO)(Im)] (called NAMI-A).<sup>1,2</sup> This work represents a continuation in our systematic study of

mononuclear  $\text{Ru}^{III}$  complexes bearing cytokinins derived from 6-benzylaminopurine (L). Generally, we strive to find a relationship between structure and any type of biological activity of the prepared Ru-complexes. Regarding this work, we have prepared octahedral complexes of the composition  $[\text{trans-Ru}^{III}\text{Cl}_4(\text{DMSO})(\text{H}^+\text{L})]$  {L = e.g. 6-(2,3-dimethoxybenzylamino)purine}. The compounds have been fully characterized by elemental analysis, IR, VIS and EI+ MS spectroscopies, molar conductivity, cyclic voltammetry, magnetic measurements, and single crystal X-ray analysis. The *in vitro* cytotoxicity of the complexes against selected human cancer cell lines and SOD-like antiradical activity have also been evaluated. The conclusions concerning structure-activity relationship will be discussed in the framework of the presentation.

*This research was supported by The Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (a grant no. MSM6198959218).*

- [1] Clarke J. M., *Coord. Chem. Rev.* 232 (2002) 69-93.  
 [2] Allesio E., Mestroni G., Bergamo A., Sava G., *Ruthenium Anticancer Drugs*, New York (2004).



## 2Po-Ut23

### CHALKOGENIDOVÁ SKLA Ga-Ge-Sb-Se DOTOVANÁ $\text{Pr}^{3+}$ IONTY

P. ŠOURKOVÁ<sup>1</sup>, B. FRUMAROVÁ<sup>2</sup>, M. FRUMAR<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Katedra obecné a anorganické chemie

<sup>2</sup>Společná laboratoř chemie pevných látek Ústavu makromolekulární chemie AV ČR a Univerzity Pardubice

<sup>3</sup>Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická

Korešpondenční autor: pavla.sourkova@upce.cz

Byla studována skla systému **Ga-Ge-Sb-Se** dotovaná  $\text{Pr}^{3+}$  ionty.

Skla byla připravena přímou syntézou v křemenných, evakuovaných ampulích v elektrické odporové peci [1].

Maximální teplota syntézy (doba syntézy) byla  $850\text{ }^{\circ}\text{C}$  (16 hod). Skelné vzorky byly připraveny kalením ampulí s taveninou na vzduchu. Takto připravené vzorky byly následně temperovány (3hod) při teplotě  $20\text{ }^{\circ}\text{C}$  pod jejich transformační teplotou  $T_g$ .

Homogenita a kompozice připravených skel byla ověřena pomocí skenovacího elektronového mikroskopu JEOL JSM-5500LV s rentgenovým energiově disperzním (EDX) mikroanalýzátorem (IXRF Systems).

Hodnoty teplot skelné transformace  $T_g$  a teplot krystalizace skel  $T_x$  byly stanoveny metodou DSC. Pro systémy skel  $100-x(\text{Ga}_5\text{Ge}_{25}\text{Sb}_{10}\text{Se}_{60})x\text{Pr}_2\text{Se}_3$  ( $x=0.1-0.6$ ) a  $\text{Ga}_5\text{Ge}_{15}\text{Sb}_{20}\text{Se}_{60}$  jsou hodnoty  $T_g = 283$  a  $253\text{ }^{\circ}\text{C}$  [2]. Důležitým zjištěním byla absence krystalizačního píku na DSC křivkách, což obecně značí vyšší termickou stabilitu systému.

Struktura skel  $(\text{Ga}_5\text{Ge}_{25}\text{Sb}_{10}\text{Se}_{60})x\text{Pr}_2\text{Se}_3$  ( $x=0.1-0.6$ ) a  $\text{Ga}_5\text{Ge}_{15}\text{Sb}_{20}\text{Se}_{60}$  byla studována pomocí Ramanovy spektroskopie. Redukovaná Ramanova spektra byla získána s využitím Schucker-Gammonovy rovnice. Spektra skel obsahují tři široké vibrační pásy, kdy maximum nejintenzivnějšího pásu leží v oblasti  $204\text{ cm}^{-1}$  s ramenem mezi  $167 - 183\text{ cm}^{-1}$ . Další dva pásy leží v oblasti  $50 - 150\text{ cm}^{-1}$  a  $235 - 340\text{ cm}^{-1}$ . Pro přesnější charakterizaci získaných redukovaných Ramanových spekter byly tyto tři pásy rozloženy do několika individuálních pásů (Gaussian) a ty byly po té přiřazeny jednotlivým strukturním jednotkám. Základními strukturními jednotkami jsou tetraedry  $\text{GeSe}_4$  a pyramidy  $\text{SbSe}_3$ .

*Grant Agency of Czech Rep. No. 203/06/0627 and project of the Academy of the Academy of Sci. of the Czech Rep. AVOZ 40500505 and SVOS s.r.o. Přelouč, CZ.*

- [1] H.L. Ma, Y. Guimond, X.H. Zhang, and J. Lucas, J. Non-Cryst. Solids, 256&257, 165-169 (1999).  
 [2] S. Hocde, C. Boussard-Plédel, G. Fonteneau, D. Lecoq, H.-L. Ma, J. Lucas, J. Non-Cryst. Solids 274 (2000) 17-22

## 2Po-Ut24

### INTERAKCIA BENZOTRIAZOLU S RÔZNYMI MONOIONICKÝMI FORMAMI MONTMORILLONITU

M. SAPIETOVÁ<sup>1</sup>, E. JÓNA<sup>2</sup>, K. JESENÁK<sup>3</sup>, P. BILLIK<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Trenčianska univerzita Alexandra Dubčeka, Fakulta priemyselných technológií, Katedra chémie a technológie anorganických materiálov

<sup>2</sup>Katedra chémie a technológie anorganických materiálov, Fakulta Priemyselných technológií v Púchove, Trenčianska Univerzita v Trenčíne

<sup>3</sup>Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta

<sup>4</sup>Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 84215 Bratislava 4

Korešpondenčný autor: [sapietova@fpt.tuni.sk](mailto:sapietova@fpt.tuni.sk)

Montmorillonit patrí medzi ílové minerály s expandujúcou štruktúrou, známe pod názvom smektity. Získava sa z horniny bentonit, ktorá je zložená prevažne z mikrokryštalických častíc montmorillonitu koloidných rozmerov [1]. Montmorillonit sa vyznačuje svojimi vynikajúcimi katalytickými a sorpčnými vlastnosťami. Interkaláciou organických zlúčenín do medzivrstvia montmorillonitu sa môže zvýšiť katalytická aktivita a životnosť katalyzátora [2]. Spôsob interakcie vodných roztokov benzotriazolu s Mn<sup>+</sup>-montmorillonitom (Mn<sup>+</sup> = Co<sup>2+</sup>, Ni<sup>2+</sup> a Cu<sup>2+</sup>) sa študoval za účelom získania poznatkov o možnosti imobilizácie benzotriazolu v pórovitých materiáloch. Medzi rozhodujúce faktory, ktoré vplývajú na interkalačný proces, patrí pH nasýtených roztokov benzotriazolu a typ vymeniteľného kationu v medzivrstvom priestore montmorillonitu. Na identifikáciu vzniknutých organomontmorillonitov sa použili infračervená spektroskopia, RTG difrakčná analýza a elementárna analýza. V kyslej oblasti pH benzotriazol existuje prevažne ako kation, v slabo kyslej oblasti pH sa viaže ako neutrálna molekula na vymeniteľný kation, zatiaľ čo v zásaditej oblasti pH sa viaže vo forme aniónu. Výsledky predkladanej práce ukázali, že rôzne monoiónové formy montmorillonitu sú vhodné na zachytávanie a imobilizáciu heterocyklických toxických látok, menovite benzotriazolu, ktorý sa používa ako pesticíd resp. herbicíd, a tým možno dosiahnuť ochranu životného prostredia. Z hľadiska iónov kovov použitých v tejto práci sa ukázali ako najvhodnejšie Co<sup>2+</sup> resp. Cu<sup>2+</sup>, ktoré súčasne patria medzi významné biogénne prvky [3].

Táto práca vznikla za podpory grantov VEGA 1/3161/06 a KEGA 3/3230/05.

- [1] Yariv S., Cross H.: *Organo-Clay Complexes and Interactions*, Marcel Dekker, Inc., New York-Basel 2002
- [2] Varma R. S.: *Tetrahedron*, 58, 1235 (2002)
- [3] Kowalska M., Güler H. and Cocke D. L.: *Sci. Tot. Envir.* 141, 223 (1994)

## 2Po-Ut25

### SYNTEZA 8-NITRILIO KOBALT-BIS(1,2-DIKARBOLIDOVÉHO) (1-) ANIONTU A NOVÝCH DUSÍKATÝCH DERIVÁTŮ Z NĚJ ODOVOZENÝCH

M. KVÍČALOVÁ<sup>1</sup>, J. PLEŠEK<sup>2</sup>, V. ŠÍCHA<sup>2</sup>, I. CÍSAŘOVÁ<sup>3</sup>, B. GRÜNER<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ústav anorganické chemie AV ČR

<sup>2</sup>ÚACH AV ČR, v.v.i., 250 68 Řež

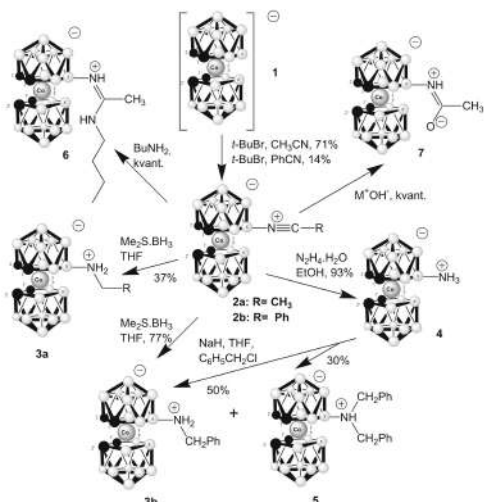
<sup>3</sup>Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra anorganické chemie

Korešpondenčný autor: [magda@iic.cas.cz](mailto:magda@iic.cas.cz)

Nejdůležitějším substitučním mechanismem na skeletu kobalt bis(dikarbolidového)(1<sup>-</sup>) aniontu (**1**, COSAN) je tzv. "elektrofilem indukovaná nukleofilní substituce" (EINS)<sup>1</sup>. Prvním krokem reakce je odštěpení hydridického vodíku v poloze 8 COSANového skeletu působením vhodného elektrofilu, což umožňuje následný atak nukleofilního činidla. Tento mechanismus se uplatňuje také při přípravě 8-nitrilio derivátů COSANu **2a**, **2b**, kde se jako nejvhodnější elektrofilní činidlo ukázal *tert*-butylbromid. Nové látky typu **2** jsou výbornými prekursory pro peptidovou škálu dalších syntéz. Dosud synteticky nedostupné 8-H<sub>2</sub>N<sup>+</sup>-CH<sub>2</sub>R deriváty **3a,3b** aniontu **1** byly připraveny redukcí nitrilové skupiny pomocí BH<sub>3</sub>.SMe<sub>2</sub>, zatímco 8-NH<sub>3</sub><sup>+</sup> derivát **4** aniontu **1** byl získán její hydrazinolýzou. Pro syntézu vyšších amoniových derivátů (8-H<sub>2</sub>N<sup>+</sup>CH<sub>2</sub>C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>, **3b**, 8- HN<sup>+</sup>(CH<sub>2</sub>C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>)<sub>2</sub>, **5**) je z hlediska výtěžků výhodnější alkylace základního 8-NH<sub>3</sub><sup>+</sup> derivátu **4**. Nitril **2a** je dále možné téměř kvantitativně transformovat reakcemi s aminy nebo alkalickými hydroxidy na odpovídající amidiny **6** či amidy **7**. Sloučeniny **1a-6** byly testovány jako inhibitory HIV proteázy. Sloučeniny **3,4** lze reakcí s *p*-nitrofenyl-(difenyfosforyl)acetátem<sup>2</sup> převést na příslušné 8-*N*-(alkylkarbamoylmethyl)difenyfosfinoxidové(8-CMPO) deriváty aniontu **1**. Bylo zjištěno, že tyto látky jsou velmi účinná extrakční činidla lanthanoidů a aktinoidů ze silně kyselých radioaktivních odpadů.

Autoři děkují Grantové agentuře Akademie věd ČR (grant IAA400310613) a MŠMT ČR (projekt LC 523) za finanční podporu

- [1] J. Plešek, S. Heřmánek, A. Franken, I. Císařová, C. Nachtigal : *Chem. Commun.* 62, 47 (1997)
- [2] B. Grüner, J. Plešek, J. Bába, I. Císařová, J. F. Dozol, H. Rouquette, C. Viñas, P. Selucký, J. Rais: *New J. Chem.* 1519, 26 (2002)



## 2Po-Ut26

## TEXTURÁLNÍ PARAMETRY MEMBRÁN VYROBENÝCH Z UHELNÉ HMOTY

M. LHOTKA<sup>1</sup>, V. FÍLA<sup>2</sup>, I. KOUTNÍK<sup>3</sup><sup>1</sup> Vysoká škola chemicko-technologická Praha<sup>2</sup> Ústav anorganické technologie, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6<sup>3</sup> Katedra chemie, VŠB-TU Ostrava, 17.listopadu 5, 708 33, Ostrava-Poruba

Korešpondenčný autor: miloslav.lhotka@vscht.cz

Znalost poréznej štruktúry a s ní súvisiacich štruktúrnych parametrov je jednou z podmienok úspešnej aplikácie poréznych materiálov v chémii a chemickú technológii ako sorbentů, katalyzátorů, nosičů mikroporéznych membrán nebo membrán samotných. Na ÚAT VŠCHT v Praze se texturní a další vlastnosti materiálov určují pomocí přístrojů ASAP 2020, AutoChem II a heliového pyknometru. ASAP 2020 využívá pro své měření převážně adsorpční izotermu N<sub>2</sub>. Zpracováním získaných výsledků pomocí metody BET lze získat měrný povrch mezopórů, s využitím BJJ metody získáme distribuci objemu a plochy mezopórů, pomocí izotermu Dubinina lze určit distribuci objemu a plochy mikropórů. Přístroj AutoChem II dovoluje stanovit TPD-spektrum (teplotně programovaná desorpce) pro vybrané plyny, příp. pro směsi plynů, na základě získaných parametrov lze stanovit sorpční kapacity. Těchto metod je využíváno rámci projektu GAČR 106/05/0492 ke studiu štruktúry připravených membrán v závislosti na podmínkách přípravy, jako jsou teplota, tlak, doba sintrace a velikost výchozích částic. Tento výzkum je podporován Grantovou agenturou ČR, projekt č. 106/05/0492. a výzkumným záměrem MŠMT ČR CZE:MSM 604 613 7301.

## 2Po-Ut27

## VYSOKOTEPLTNÁ KLASIFIKÁCIA MONTMORILLONITU „KUNIPIA“

J. HRACHOVÁ<sup>1</sup>, M. VARGOVÁ<sup>2</sup>, V.Š. FAJNOR<sup>2</sup><sup>1</sup> Ústav anorganické chémie SAV, Bratislava<sup>2</sup> Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra anorganické chémie

Korešpondenčný autor: uachjana@savba.sk

Ílový minerál montmorillonit sa vďaka relatívne rozsiahlaj izomorfnej substitúcii atómov hliníka v centrách oktaedrickej siete atómami horčíka a/alebo atómami železa vyskytuje v prírode v dvoch vysokoteplotných typoch: typ „Wyoming“ a typ „Cheto“ [1]. Pri type „Wyoming“ kryštalizuje z röntgenoamorfneho anhydridu montmorillonitu cristobalit a mullit, pri type „Cheto“ kremeň a spinel. Podobne je to aj v prípade syntetického minerálu [2]. Priemyselne významná lokalita skúmaného montmorillonitu sa nachádza v prefektúre Yamagata, v severozápadnej časti japonského ostrova Honšu. Tento montmorillonit sa ťaží v podzemnej bani a jeho sodná forma je komerčne dodávaná pod obchodným názvom Kunipia-F. Kryštalochemický vzorec je  $\text{Na}_{0,84}\text{Ca}_{0,05}\text{K}_{0,01}[\text{Si}_{7,82}\text{Al}_{0,18}][\text{Al}_{3,19}\text{Mg}_{0,52}\text{Fe}_{0,21}]\text{O}_{20}(\text{OH})_4 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ . Celkový merný povrch stanovený meraním adsorpcie etylglykolmonoetyléru (EGME) je 750 m<sup>2</sup>/g. Zo stanovenej hodnoty kapacity výmeny katiónov - 1,15 mmol/g, možno usudzovať, že minerál je na rozhraní medzi typom „Wyoming“ a typom „Cheto“.

Vysokoteplotné fázy boli získané dvojhodinovým žiňaním vzoriek v mufľovej peci a identifikované röntgenovou difrakčnou analýzou. Žiňaním pri teplote 900 °C sa získal röntgenoamorfny produkt, v ktorom sa prejavila nepatrná prímies kremeňa. Pri teplote 1000 °C sa objavili difrakcie cristobalitu a mullitu (prímies kremeňa rekryštalizuje na cristobalit). Žiňaním pri teplote 1100 °C sa difrakcie cristobalitu zvyrazňujú, kým difrakcie mullitu svoju intenzitu nemenia. Žiňanie pri teplote 1200 °C vedie k zániku difrakcií cristobalitu. Jedinou kryštalicou vysokoteplotnou fázou je mullit (difrakcie cordieritu - typickej vysokoteplotnej fázy montmorillonitu typu „Cheto“ - sa neobjavili ani v náznakoch).

Na základe vzniku a vývoja uvedených vysokoteplotných fáz montmorillonit „Kunipia“ možno jednoznačne priradiť k vysokoteplotnému typu „Wyoming“.

[1] R.E.Grim, G. Kulbicki: Am. Mineralogist 46, (1961), 1329 - 1369.

[2] V. Š. Fajnor, H. Gerthofferová, L. Kuchta, J. Masár: J. Thermal Anal. 24, (1982), 51 - 57.

## 2Po-Ut28

## ION-IMPLANTATION INTO CHROMIUM DOPING SILICATE GLASS

S. JANÁKOVÁ<sup>1</sup>, B. ŠVECOVÁ<sup>1</sup>, J. ŠPIRKOVÁ<sup>2</sup>, M. MÍKA<sup>3</sup>, P. NEKVINDOVA<sup>2</sup>, J. OSWALD<sup>4</sup>, A. MACKOVÁ<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Vysoká škola chemicko-technologická Praha

<sup>2</sup>Department of Inorganic Chemistry, Institute of Chemical Technology, Technická 5, 166 28 Prague, Czech Republic

<sup>3</sup>Department of Glass and Ceramics, Institute of Chemical Technology, Technická 5, 166 28 Prague, Czech Republic

<sup>4</sup>Institute of Physics, Czech Academy of Sciences, Cukrovarnicka 10, 162 53 Prague, Czech

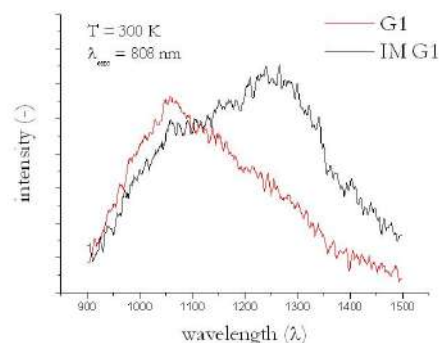
<sup>5</sup>Nuclear Physics Institute, Czech Academy of Sciences, 250 68 Rez, CR

Korešpondenčný autor: stanislava.janakova@vscht.cz

Luminescence around 1300 nm is required in photonics for lasers working in near infrared (NIR) region. For this application, luminescence ascribed to Cr(IV) exhibit suitable characteristics, however achievement of this emission in silicate glass showed complicated. Here we present a novel approach to this problematic, an ion-implantation of oxygen ions into the sodium-silicate Cr(III) glass and the study how this injection of oxygen affect the luminescence spectra. The composition of the glasses in our study corresponds to higher optical basic silicate glasses. Developed material were characterized compositionally, optically and the effect of ion implantation on luminescence properties was studied. Possible formation of Cr(IV) is discussed. We have proved that the O<sup>+</sup> ion implantation may change the redox equilibrium in the sodium-silicate glass, moreover, due to special nature of the induced defects, it is possible to create and stabilized oxidation states which are rather exotic as, in this particular case, Cr(IV).

*Acknowledgement: The research has been supported by the GACR grant 106/05/0706 and the VC project LC 06041.*

- [1] J.A. Duffy ; M.D. Ingram , J. Non-Cryst 21 (1976) 373-410
- [2] T. Murata, M. Torisaka, H. Takebe, K. Morinaga, J. Non-Cryst 220 (1997) 139-146;
- [3] A.M. Malyarevich et al., , J. Non-Cryst. S. 351 (2005) 3551-3555



Emission spectra ( $\lambda_{exc}=808$  nm) of the glasses before (G1) and after ion implantation (IM G1). The implanted sample IM G1 (B) obviously reveals a new emission band peaking at 1300 nm which can be attributed to the desired Cr(IV). That means that oxygen imp

## 2Po-Ut29

## STUDY OF ION-EXCHANGE PROCESSES IN GLASS SUBSTRATES USED FOR FABRICATION OF PLANAR OPTICAL WAVEGUIDES

B. ŠVECOVÁ<sup>1</sup>, J. ŠPIRKOVÁ<sup>2</sup>, P. NEKVINDOVA<sup>2</sup>, S. JANÁKOVÁ<sup>1</sup>, M. MÍKA<sup>3</sup>, F. LAHODNÝ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vysoká škola chemicko-technologická Praha

<sup>2</sup>Department of Inorganic Chemistry, Institute of Chemical Technology, Technická 5, 166 28 Prague, Czech Republic

<sup>3</sup>Department of Glass and Ceramics, Institute of Chemical Technology, Technická 5, 166 28 Prague, Czech Republic

Korešpondenčný autor: blanka.svecova@vscht.cz

Photonics devices with planar optical waveguides are becoming nowadays often used for distribution and harnessing of optical radiation, which is for data transport much profitable comparing with that utilizing electric signal. The main advantage of the photonics-based devices is that they are rather simple, fast and faultlessly operating. However, rather high cost of such devices, which must be necessarily borne in mind during their fabrication, is still a serious problem that restrains their routine utilization. Thus, good understanding of the processes occurring during formation of the optical waveguides is of the key importance to lower the cost and improve the effectiveness of their production.

Here we focus on a study of the processes occurring during ion exchange fabrication of the optical waveguides in glass substrates. For that we used a variety of the glass substrates, commercially available, custom made as well as specially designed ones, differing each from other in their chemical composition. For the fabrication of the waveguides several types of the ion exchanges were applied and the waveguiding thin layers in the surfaces of the glass substrates were characterized from the point of view of their chemical composition and optical (waveguiding) properties as well as diffusion coefficients

of the pertinent glass matrices. On the bases of the obtained results the relations between the composition of the substrates and course of the ion exchange processes and properties of the resultant waveguides are discussed.

*This work has been supported by GACR 106/05/0706.*

## 2Po-Ut30

### PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE MEMBRÁN NA BÁZI TITANOSILIKÁTU

Z. CÍLOVÁ<sup>1</sup>, V. FÍLA<sup>2</sup>, M. LHOTKA<sup>3</sup>

<sup>1</sup>VŠCHT Praha

<sup>2</sup>Ústav anorganické technologie, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6

<sup>3</sup>Vysoká škola chemicko-technologická Praha

Korešpondenční autor: [cilovaz@vscht.cz](mailto:cilovaz@vscht.cz)

Titanosilikát ETS-4 se díky své struktuře a velikosti pórů jeví jako perspektivní materiál vhodný pro separaci směsi plynů s podobnou velikostí molekul (např. směs H<sub>2</sub>/N<sub>2</sub>).

Při přípravě mikroporézní vrstvy ETS-4 bylo vyzkoušeno několik metod přípravy. Nejvhodnější se jeví syntéza založená na titanium(IV) butoxidu. Postup vycházel z práce Coutinho et. al [1]. Byl studován vliv použitého nosiče a podmínek hydrotermální syntézy na výslednou kvalitu připravené vrstvy. Vzorky, na které byla úspěšně nanesena vrstva titanosilikátu ETS-4 byly hodnoceny pomocí rastrovacího elektronového mikroskopu.

Pro přípravu vrstev byly použity následující typy nosičů: kovové (GKN SIKA R 0,3 AS), keramické na bázi aluminu a nosiče připravené v rámci projektu GAČR 106/05/0492 na bázi uhelné hmoty. Jako méně vhodné se pro přípravu ETS-4 jeví keramické nosiče, protože u nich dochází k rozpouštění nosiče vlivem vysokého pH používané syntézní směsi.

Byl studován vliv teploty hydrotermální syntézy v rozsahu 150-250 °C jako optimální byla určena teplota 200 °C. Počet cyklů hydrotermální úpravy má značný vliv na vlastnosti požadované vrstvy.

*Tato práce vznikla s finanční podporou Grantové agentury ČR, projekt č. 106/05/0492 a výzkumného záměru MŠMT ČR CZE:MSM 604 613 7301.*

[1] Coutinho D. et. al, Microporous and Mesoporous Materials 90 (2006) 229-236.

## 2Po-Ut31

### SOLVATOMORFIE VINANU DIHYDROERGOTAMINU

M. ROBSTECKOVA<sup>1</sup>, J. ČEJKA<sup>1</sup>, A. JEGOROV<sup>2</sup>

<sup>1</sup>VŠCHT Praha, Ústav chemie pevných látek, Technická 5, 166 28 Praha 6

<sup>2</sup>TEVA Pharmaceuticals, s.r.o.

Korešpondenční autor: [michaela.robsteckova@vscht.cz](mailto:michaela.robsteckova@vscht.cz)

Dihydroergotamin (DHE) patří do skupiny námelových alkaloidů. DHE je antidepresivum 1. generace působící nepříliš selektivně na zpětné vychytávání noradrenalinu, dopaminu a serotoninu. Podobně jako většina dalších námelových alkaloidů je produkován parazitickou houbou paličkovciví nachovou (*Claviceps purpurea*). Práce se zabývá přípravou a studiem solvátů dané látky, tedy schopností látky tvořit krystaly zabudováním molekul rozpouštědla do struktury. Z farmaceutického hlediska je hledání solvatomorfních sloučenin důležitým úkolem, neboť různé solvatomorfy mohou mít rozdílný farmakokinetický profil a biologické účinky. Jednotlivé krystaly DHE byly připravovány krystalizací z alkoholů a jejich struktura byla vyhodnocena pomocí Rtg difrakce monokrystalů. Jsou známy dvě struktury solvátů vinanu dihydroergotaminu, jejichž struktury jsou nepřesné, molekuly rozpouštědla se nepodařilo přesně lokalizovat. Cílem práce byla příprava kvalitnějších krystalů, která by umožnila přesně zmapovat distribuci molekul různých rozpouštědel v rozsáhlých kavitách uvnitř dané struktury a analýza volného prostoru uvnitř dané struktury. Byly připraveny tři struktury vinanu dihydroergotaminu a z toho dva solváty a jedna báze. Ve struktuře vinanu dihydroergotaminu methanol solvátu byly lokalizovány molekuly methanolu ve dvou pozicích s poloviční okupací a ve struktuře ethanol solvátu se molekuly ethanolu vyskytují ve dvou pozicích s poloviční a čtvrtinovou okupací. Krystalizací z propanolu byla připravena báze DHE, jejíž struktura neobsahuje kyselinu vinnou. Dále byl analyzován volný prostor u struktur solvátů DHE.

*Tato práce byla podpořena fondem Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy MSM 6046137302.*

[1] Řeháč Z., Sajdl P.: Ergot Alkaloids - Chemistry, Biological Effects, Biotechnology, Academia Praha, 1990.

## 2Po-Ut32

### ULTRASONIC ROUTE TO CoFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> BY SONOLYSIS OF M(acac)<sub>n</sub> COMPLEXES

P. OSTŘÍŽEK<sup>1</sup>, J. PINKAS<sup>1</sup>, R. ZBOŘIL<sup>2</sup>, P. BEZDÍČKA<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Masarykova univerzita, Přírodovědecká fakulta, Ústav chemie

<sup>2</sup>Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta, Katedra fyzikální chemie

<sup>3</sup>Ústav anorganické chemie, v.v.i., AVČR, Řež

Korešpondenčný autor: petr@ostrizek.com

Composite nanoscopic particles consisting of Co-Fe oxide nanoparticles embedded in an organic matrix were prepared by sonolysis [1] of mixtures of 2,4-pentanedionato complexes,  $M(\text{acac})_n$ ,  $M = \text{Fe, Co}$ ;  $n = 2, 3$ ; in a particular stoichiometric ratio. The reactions were carried out under anhydrous conditions in tetraglyme under Ar atmosphere. Addition of variable amounts of was found to facilitate decomposition of  $\text{Fe}(\text{acac})_3$  water [2]. That allowed control the organics content and the BET surface area of the oxide nanoparticles. The reactivity of precursors under sonochemical conditions was found to follow the order:  $\text{Co}(\text{acac})_2 > \text{Fe}(\text{acac})_3 > \text{Co}(\text{acac})_3$ . To obtain the stoichiometric spinel  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$  on calcination, a 1:3 molar ratio of  $\text{Co}(\text{acac})_2:\text{Fe}(\text{acac})_3$  had to be used for more reactive Co(II) precursor. In the case of the inert Co(III) complex, a sufficient ratio was 1:1.7 for  $\text{Co}(\text{acac})_3:\text{Fe}(\text{acac})_3$ . According to the XRD results, phase pure  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$  samples were prepared with molar content of Co:Fe from 1:1.3 to 1:2.0. SEM was used to examine particle shape, size, and size distribution. Iron-cobalt oxide product featured nanoscopic composite particles of a uniform size distribution and nearly spherical shapes with an estimated diameter of 20 nm. The organic components of the powders were identified by IR as acetate groups. TEM evidenced the amorphous nature of the sonochemical oxide product and its crystallization above 300 °C (Fig. 1) in agreement with the results of thermal behavior studies by TG and DSC methods. HT XRD also revealed the spinel crystallization on heating and, most importantly, retention of a small particle diameter below 20 nm up to 600 °C. The delayed crystal growth is ascribed to the protective action of a thin surface layer of pyrolyzed organics.

Acknowledgement: MSM0021622410 and MSM6198959218.

[1] Y. Mastai, A. Gedanken, in: C.N.R. Rao, A. Mueller, A.K. Cheetham (Eds.), *The Chemistry of Nanomaterials*, Wiley-VCH, NY (2004) 113.

[2] J. Pinkas, V. Reichlova, R. Zboril, Z. Moravec, P. Bezdicka, J. Matejkova, *Ultrasonics Sonochem.* 14 (2007) in press.

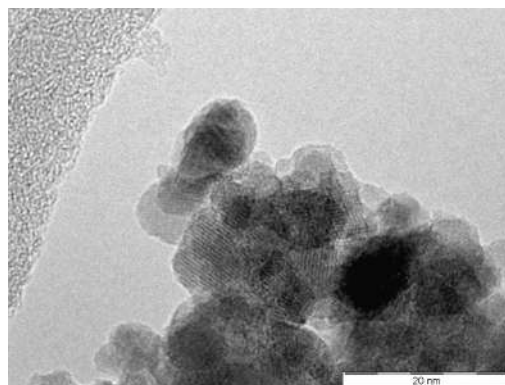


Fig. 1 TEM of  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$  particles calcined to 400 °C.

## 2Po-Ut33

### OPTICKÉ VLASTNOSTI TENKÝCH VRSTEV ( $\text{As}_2\text{Se}_3$ ) $_{80-x}$ ( $\text{As}_2\text{Te}_3$ ) $_x$ ( $\text{SnTe}$ ) $_20$

V. PARCHANSKI<sup>1</sup>, B. FRUMAROVÁ<sup>2</sup>, M. FRUMAR<sup>3</sup>, M. HRDLIČKA<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Katedra obecné a anorganické chemie

<sup>2</sup>Společná laboratoř chemie pevných látek Ústavu makromolekulární chemie AV ČR a Univerzity Pardubice

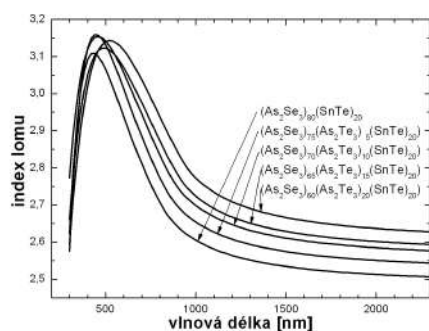
<sup>3</sup>Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko technologická

Korešpondenčný autor: vaclav.parchanski@upce.cz

Byly připraveny tenké vrstvy o složení  $(\text{As}_2\text{Se}_3)_{80-x}(\text{As}_2\text{Te}_3)_x(\text{SnTe})_{20}$ , kde  $x = 0, 5, 10, 15, 20$ , metodou pulzní laserové depozice (PLD) (výkon laseru 200mJ/pulz, frekvence pulzů 20 Hz, hustota energie na targetu 1,2 J/cm<sup>2</sup>, tlak cca 2.10E-4 Pa). Složení tenkých vrstev bylo potvrzeno EDX mikroanalýzou a je v dobré shodě se složením výchozího targetu. Byly studovány jejich optické vlastnosti (index lomu, spektrální závislost indexu lomu, spektrální závislost absorpčního a extinkčního koeficientu) v závislosti na složení tenkých vrstev. Bylo zjištěno, že hodnota indexu lomu roste s rostoucím obsahem telluru substituovaného za selen z hodnot 2,51 na 2,64 (při  $\lambda = 2 \mu\text{m}$ ). Poloha krátkovlnné absorpční hrany (závislost absorpčního koeficientu na energii záření) se s rostoucím obsahem telluru v tenkých vrstvách posouvá směrem k delším vlnovým délkám (nižším energiím), což souvisí se snížením optické šířky zakázaného pásu Eg.

Výzkum byl podporován grantem GAČR 203/06/0627, 6. RP EU CAMELS a projektem AV ČR AV0Z 40500505





Index lomu tenkých vrstiev  $(As_2Se_3)_{80-x}(As_2Te_3)_x(SnTe)_{20}$

## 2Po-Ut34

### KOMPLEXNÍ SLOUČENINY OBSAHUJÍCÍ $Er^{3+}$ A $Yb^{3+}$ VHODNÉ PRO PŘÍPRAVU OPTICKÝCH VLNOVODŮ

J. ONDRÁČKOVÁ, P. TŘEŠŇÁKOVÁ

VŠCHT Praha

Korešpondenčný autor: *Jana. Ondrackova@vscht.cz*

V súčasnej dobe jsou běžnou součástí telekomunikačních systémů optické vlnovody obsahující  $Er^{3+}$  a  $Yb^{3+}$  ionty. Pro optimální funkci takové optické struktury je žádoucí, aby byl laserově aktivní prvek přítomen pouze ve funkční části součástky, tedy ve vlnovodné oblasti. Jedním ze základních problémů tohoto výzkumu, je syntéza a charakterizace nových koordinačních sloučenin erbia s objemnými ligandy. Požadavků, které jsou na ligandy kladeny je mnoho. Mezi nejvýznamnější patří minimální počet kyslíkových atomů a současná snadnost rozkladu připravené koordinační sloučeniny. Současně by měl být splněn požadavek minima hydroxylových skupin, které způsobují významné zkrácení doby života excitovaných stavů  $Er^{3+}$ . Optické vrstvy připravené s využitím navzájem komplexních sloučenin pak vykazují vysokou optickou aktivitu.

## 2Po-Ut35

### ANALÝZA TENKÝCH VRSTVIEV ZNO:AL PRIPRAVENÝCH RF NAPRAŠOVANÍM POMOCOU AFM A SIMS

D. HAŠKO<sup>1</sup>, A. VINCZE<sup>1</sup>, J. KOVÁČ<sup>2</sup>, I. NOVOTNÝ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, Bratislava

<sup>2</sup>Katedra mikroelektroniky, Fakulta elektrotechniky a informatiky, Slovenská Technická Univerzita, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava

Korešpondenčný autor: *hasko@ilc.sk*

Jedným z perspektívnych polovodičových materiálov pre aplikácie v optoelektronike je ZnO [1]. Tento priamy II-IV polovodič n-typu má hexagonálnu štruktúru, veľkú šírku zakázaného pásma ( $E_G = 3.3$  eV) a veľkú excitačnú väzobnú energiu (60 meV) [2]. Čistý ZnO je transparentný pre vlnové dĺžky 400 - 700 nm a má nízku elektrickú vodivosť. Proces žihania ZnO v ochranej atmosfére umožňuje modifikovať elektrickú vodivosť pri súčasnom zachovaní transparentnosti vo viditeľnej oblasti spektra žiarenia [3]. Tenké vrstvy ZnO vytvorené na skle je možné využiť ako transparentné kontaktné vrstvy v solárnych článkoch, p-n prechod vytvorený na rozhraní Si/ZnO ako absorpčnú oblasť fotodetektora.

Tenké vrstvy polykryštalického ZnO:Al boli pripravené RF naprašovaním v  $Ar^+$  atmosfére na  $p^+Si$  (111) substrátoch. Na pripravených vzorkách bola sledovaná povrchová morfológia a SIMS hĺbkové profily nezažiháných vrstiev a po následnom zažihaní (RTA) na teplotu 410 - 600 °C v  $N_2$  atmosfére. Metódou AFM bola zisťovaná povrchová štruktúra polykryštalického ZnO a vyhodnotené boli parametre drsnosti a zrnitosti povrchu. SIMS profil preukázal rovnomernú distribúciu Al vo vrstve, pričom koncentrácia prvku C s hĺbkou klesá. Charakter rozhrania ZnO:Al so substrátom Si sa mení v závislosti od teploty žihania. Z dosiahnutých výsledkov bol potvrdený vplyv podmienok naprašovania a následného žihania na štruktúrne vlastnosti tenkých vrstiev ZnO.

Práca v Medzinárodnom Laserovom Centre a na Katedre Mikroelektroniky Slovenskej Technickej Univerzity bola podporená projektami VEGA č. 1/3076/06 a č. 1/3108/06, APVV č. RPEU-0005-06 a MŠMT ČR 1M06031.

- [1] J. - H Lim, et al.: UV electroluminescence emission from ZnO light-emitting diodes grown by high-temperature radiofrequency sputtering, *Advanced Materials* 18, 2006, pp. 2720 - 2724.
- [2] S. J. Pearton, et al.: Recent progress in processing and properties of ZnO, Superlattices and Microstructures 34, 2003, pp. 3 - 32.
- [3] X.Q. Wei, et al.: Annealing effect on the microstructure and photoluminescence of ZnO thin films, *Materials Chemistry and Physics* 101, 2007, pp. 285 - 290.

## Postery – sekcia 3



**3Po-Ut1****PŘESMYKY 1-SUBST.  
9B-HYDROXY-3,3A,5,9B-TETRAHYDRO-1H-  
IMIDAZO[4,5-C]CHINOLIN-2,4-DIONŮ.  
NEOČEKÁVANÁ CESTA K NOVÝM  
INDOLOVÝM A IMIDAZOLINONOVÝM  
DERIVÁTŮM**A. LYČKA<sup>1</sup>, A. KLÁSEK<sup>2</sup><sup>1</sup> Výzkumný ústav organických syntéz a.s. Pardubice<sup>2</sup> Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Fakulta technologická, Ústav chemie

Korešpondenční autor: antonin.lycka@vuos.com

1-Substituované 3a-alkyl/aryl-9b-hydroxy-3,3a,5,9b-tetrahydro-1H-imidazo[4,5-c]chinolin-2,4-diony a 3'-substituované 3-alkyl/aryl-3-ureido-1H,3H-chinolin-2,4-diony poskytují ve vroucí kyselině octové 2-alkyl/aryl-1H-indol-3-yl-močoviny nebo 1,3-bis[2-(2-oxo-2,3-dihydro-1H-imidazol-4-yl)-fenyl]močoviny. První z nich působením kyseliny chlorovodíkové podléhají přesmyku za vzniku 4-(2-aminofenyl)-1,3-dihydroimidazol-2-onů. Struktura 1,3-bis[2-(2-oxo-2,3-dihydro-1H-imidazol-4-yl)-fenyl]močoviny byla potvrzena nezávislou syntézou. Všechny látky byly charakterizovány pomocí <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C NMR a IČ spekter, APCI hmotnostních spekter, a u některých z nich byla změřena i <sup>15</sup>N NMR spektra [1].

Autoři děkují Grantové agentuře České republiky za finanční podporu (grant 203/07/0320).

[1] Klásek A., Lyčka A., Holčapek M., Tetrahedron 2007, 63, v tisku.

**3Po-Ut2****VLIV ORGANICKÉ POVRCHOVÉ ÚPRAVY  
RUTILOVÉHO KALCINÁTU NA STABILITU  
SMĚSÍ PVC**L. MASTNÝ<sup>1</sup>, R. KALOUSKOVÁ<sup>2</sup>, Z. ŠRANK<sup>2</sup>, M. PLEŠKOVÁ<sup>3</sup><sup>1</sup> VŠCHT v Praze, Ústav anorganické chemie<sup>2</sup> Vysoká škola chemicko-technologická Praha<sup>3</sup> VŠCHT Praha

Korešpondenční autor: Libor.Mastny@vscht.cz

Při technologickém postupu výroby titanové běloby tzv. sulfátovým způsobem je jedním z významných kroků, rozhodujícím o kvalitativních parametrech konečného pigmentu, tepelné zpracování gelu hydratovaného oxidu titaničitého - kalcinace. Tato operace se provádí v rotačních pecích. Cílová teplota a rychlost jejího nárůstu mají významný vliv na kvalitu připraveného kalcinátu, a to jak z pohledu jeho fázového složení, tak i dosažených optických parametrů, měrného povrchu a tvrdosti. Vzhledem ke skutečnosti, že vyrobený rutilový kalcinát se pouze mikronizuje bez jakékoli anorganické povrchové

úpravy, patří z ekonomického hlediska mezi zajímavé titanové běloby. Za předpokladu vhodné organické povrchové úpravy zajišťující dobrou dispergovatelnost v plastech se takto upravený kalcinát stává vhodným pigmentem v aplikacích, kde se nevyžaduje vysoká světelná a povětrnostní odolnost. V práci byla sledována možnost zlepšení aplikačních vlastností běžně vyráběného rutilového kalcinátu. Pigment povrchově upravený různými typy polydimethylsiloxanu byl vmíchán do stabilizovaných směsí neměkčeného PVC. Hodnocení vhodnosti aplikované povrchové úpravy kalcinátu bylo provedeno na základě měření krouťícího momentu při přípravě směsí, změně optických parametrů a dehydrochloračních měření během expozice předmětných folií teple a světlu. Vzorky byly srovnány se zahraničním povrchově neupraveným i upraveným prototypem. Z výsledků vyplývá, že organická povrchová úprava zasáhne jak zpracovatelské vlastnosti směsí stabilizovaného PVC, tak vzhled připravených folií. Prakticky ve všech případech měla povrchová úprava negativní vliv na změnu optických parametrů směsí PVC obsahujících uvedené kalcináty jak u původních nedegradovaných vzorků, tak při jejich následném tepelném i světelném namáhání.

Tato práce byla řešena jako součást výzkumného záměru MSM 6046137302 Příprava a výzkum funkčních materiálů a materiálových technologií s využitím mikro- a nanoskopických metod

**3Po-Ut3****SYNTHESIS OF SELENADIAZOLOQUINOLONE  
DERIVATIVES AND THEIR UTILIZATION  
TOWARDS 7,8-DIAMINOQUINOLINE**

M. BELLA, V. MILATA

Slovenská Technická Univerzita, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav organickej chémie, katalýzy a petrochémie, Oddelenie organickej chémie

Korešpondenční autor: viktor.milata@stuba.sk

Many quinolones are known for their biological activity. Also compounds containing selenadiazole moiety are often biologically active or photosensitive. Therefore the aim of our study was preparation of molecules containing both fused selenadiazole and quinolone moiety to obtain potentially biologically active compounds. The combination of both moieties represent 7-substituted selenadiazoloquinolones. The starting material for the synthesis of selenadiazoloquinolones was 1,2-phenylenediamine which was converted to 4-aminobenzoselenadiazole in 5 steps. Precursors of target molecules were accessed by a nucleophilic vinylic substitution of the appropriate alkoxyethylene derivatives with 4-aminobenzoselenadiazole as nucleophile. Subsequent thermal cyclisation under the conditions of the Gould-Jacobs reaction ( 250°C) led to the desired (five)

7-substituted selenadiazoloquinolones. The sixth derivative - a carboxylic acid - was produced by acid hydrolysis of the corresponding ethyl or methyl ester. Parent selenadiazoloquinolone derivative was used as the starting material for preparation of 7,8-diaminoquinoline.

We are greatfully thankful to Slovak Grant Agency under contract No. APVT-20-007304 for financial support.

### 3Po-Ut4

#### SLEDOVÁNÍ VLIVU TEPELNÉ HISTORIE FILMŮ PŘIPRAVENÝCH Z HYDROLYSÁTU KOLAGENU NA JEJICH ROZPUSTNOST

P. MOKREJŠ<sup>1</sup>, D. JANÁČOVÁ<sup>2</sup>, M. MLÁDEK<sup>3</sup>, F. LANGMAIER<sup>3</sup>, K. KOLOMAZNÍK<sup>2</sup>, V. VAŠEK<sup>2</sup>, P. ŠUJAN<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Fakulta technologická, Ústav inženýrství polymerů

<sup>2</sup>Univerzita T. Bati, Fakulta aplikované informatiky, Ústav automatizace a řídicí techniky, Nad Stráněmi 4511, 760 05 Zlín

<sup>3</sup>Univerzita T. Bati ve Zlíně, Fakulta technologická, Ústav inženýrství polymerů, nám. T. G. M. 275, 762 72 Zlín

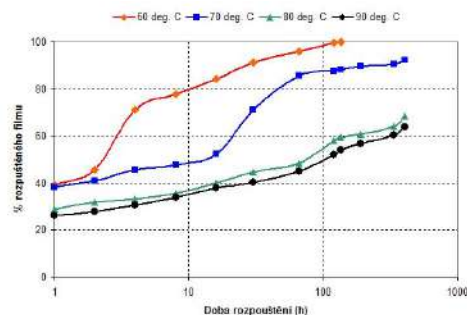
Korešpondenční autor: mokrejs@ft.utb.cz

U vzorků filmů připravených litím z roztoku hydrolysátu chromočinných postružin jsme zjišťovali, jak se mění jejich rozpustnost ve vodě v závislosti na tepelné historii filmu. Připravil se 30 % roztok rozmícháním práškového hydrolysátu kolagenu E-Hykol při teplotě 60 °C. Po rozpuštění a po úpravě pH přidávkem 1 N NaOH na 10,9-11,1 se přidalo 10 % dialdehydu škrobu (w/w, na hmotnost hydrolysátu) a po jeho rozpuštění 5 % glycerinu (na hmotnost hydrolysátu). Roztok se nalil na kruhovou silikonovou desku a film vznikl odpařením vodné fáze při 30 °C za 72 hodin. U filmu byla zjištěna tloušťka, zhodnoceny sensorické charakteristiky a byly připraveny zkušební vzorky o rozměrech 2x2 cm. Vzorky filmů byly vystaveny tepelnému působení při teplotách 60, 70, 80 a 90 °C po dobu 24 h a poté se kondicionovaly 48 h v exsíkátoru nad vysušeným silikagelem. Následně byly podrobeny zkouškám rozpustnosti ve vodě tak že se umístily do skleněné váženky, zalily se vodou a inkubovaly se při teplotě 37 °C po stanovenou dobu. Po zkoušce rozpustnosti byla nerozpuštěná část vzorku filmu separována filtrací přes filtrační papír nízké hustoty a byla vysušena při 103 °C (12 hodin). Gravimetricky se zjistilo množství nerozpuštěného filmu. Výsledkem zkoušek rozpustnosti je grafická závislost znázorňující % rozpuštěného filmu na době rozpouštění, viz obrázek. Bylo zjištěno, že tepelná historie filmů výrazným způsobem ovlivňuje jejich rozpustnost. Při vyšších teplotách dochází k dodatečnému sítování filmů a rozpustnost filmů klesá.

Auři děkují MŠMT Č. R. za finanční podporu formou grantu MSM No.

7088352102.

- [1] Smith, R. et al. Biodegradable polymers for industrial applications. CRC Press, 2005. ISBN 0849334667.
- [2] Bastioli, C. Global Status of the Production of Biobased Packaging Materials. Starch. 2001, 53, 351-355.



Závislost % rozpuštěného filmu na době rozpustnosti při teplotě rozpouštění 37 °C.

### 3Po-Ut5

#### VLASTNOSTI FILMŮ Z HYDROLYSÁTŮ KOLAGENU

P. MOKREJŠ<sup>1</sup>, D. JANÁČOVÁ<sup>2</sup>, M. MLÁDEK<sup>3</sup>, F. LANGMAIER<sup>3</sup>, K. KOLOMAZNÍK<sup>2</sup>, V. VAŠEK<sup>2</sup>, L. VÁCLAVKOVÁ<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Fakulta technologická, Ústav inženýrství polymerů

<sup>2</sup>Univerzita T. Bati, Fakulta aplikované informatiky, Ústav automatizace a řídicí techniky, Nad Stráněmi 4511, 760 05 Zlín

<sup>3</sup>Univerzita T. Bati ve Zlíně, Fakulta technologická, Ústav inženýrství polymerů, nám. T. G. M. 275, 762 72 Zlín

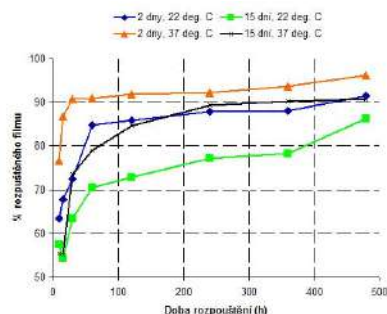
Korešpondenční autor: mokrejs@ft.utb.cz

Biodegradabilní filmy byly připraveny z kolagenního hydrolysátu získaného hydrolyzou chromočinných postružin. Sledovala se rozpustnost filmů při dvou vybraných teplotách a zjišťoval se vliv doby skladování filmů při pokojové teplotě na jejich rozpustnost. Připravil se 30 % (w/w) roztok rozmícháním práškového hydrolysátu kolagenu při teplotě 60 °C. Po rozpuštění a po úpravě pH přidávkem 1 N NaOH na 10,9-11,1 se přidalo 6 % dialdehydu škrobu (na hmotnost hydrolysátu). Roztok se nalil na kruhovou silikonovou desku a film vznikl odpařením vodné fáze při 30 °C za 72 hodin. U filmu byla zjištěna tloušťka, zhodnoceny sensorické charakteristiky a byly připraveny zkušební vzorky o rozměrech 2x2 cm. Část vzorků filmů se kondicionovala 2 dny a část 15

dní v exsikátoru nad vysušeným silikagelem. Následně byly vzorky podrobeny zkouškám rozpustnosti ve vodě tak že se umístily do skleněné váženky, zalily se vodou a inkubovaly se při teplotě 25 a 37 °C po stanovenou dobu. Po zkoušce rozpustnosti byla nerozpuštěná část vzorku filmu separována filtrací přes filtrační papír nízké hustoty a byla vysušena při 103 °C (12 hodin). Gravimetricky se zjistilo množství nerozpuštěného filmu. Výsledkem zkoušek rozpustnosti jsou grafické závislosti znázorňující % rozpuštěného filmu na době rozpouštění při měnících se podmínkách skladování a při 2 teplotách rozpouštění, viz obrázek. Bylo zjištěno, že skladováním filmů za pokojové teploty se mění jejich rozpustnost. Po 15 dnech skladování došlo k částečnému zesíťování filmů a jejich rozpustnost klesla, na rozdíl od filmů po 2 denním skladování.

Autoři děkují MŠMT Č. R. za finanční podporu formou grantu MSM No. 7088352102.

- [1] Gennadios, A et al. Application of Edible Coating on Meat, Poultry and Seafoods: A Review. *Lebensm.-Wiss. u. Technol.* 1997, 30, 337-350.
- [2] Cao, Na et al. Preparation and physical properties of soy protein isolate and gelatin composite films. *Food Hydrocolloids.* 2007, 21, 1153-1162.



Závislost % rozpuštěného filmu na době rozpustnosti po 2 a 15 dnech kondicionování.

### 3Po-Ut6

#### TERMICKÁ ANALÝSA BIODEGRADABILNÍCH FILMŮ

P. MOKREJŠ<sup>1</sup>, D. JANÁČOVÁ<sup>2</sup>, M. MLÁDEK<sup>3</sup>, F. LANGMAIER<sup>3</sup>, K. KOLOMAZNÍK<sup>2</sup>, V. VAŠEK<sup>2</sup>, L. VÁCLAVKOVÁ<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Fakulta technologická, Ústav inženýrství polymerů

<sup>2</sup>Univerzita T. Bati, Fakulta aplikované informatiky, Ústav automatizace a řídicí techniky, Nad Stráněmi 4511, 760 05 Zlín

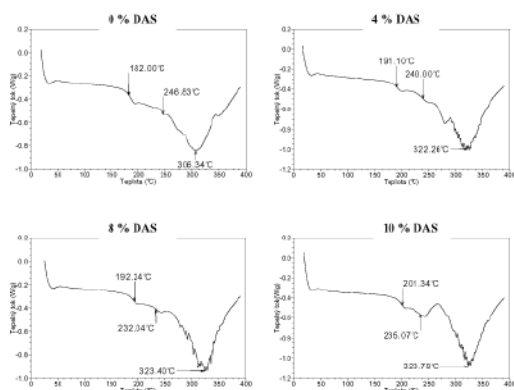
<sup>3</sup>Univerzita T. Bati ve Zlíně, Fakulta technologická, Ústav inženýrství polymerů, nám. T. G. M. 275, 762 72 Zlín

Korešpondenční autor: [mokrejs@ft.utb.cz](mailto:mokrejs@ft.utb.cz)

Z práškového kolagenního hydrolyzátu získaného enzymovou hydrolyzou chromočinných postružin byly připraveny biodegradabilní filmy s různými přísadkami síťovadla - DAS (dialdehyd škrobu). Připravil se 30 % (w/w) roztok. Po rozpuštění a po úpravě pH přísadkou 1 N NaOH na 10,9-11,1 se přidal DAS: 0-4-8-10 % (na hmotnost hydrolyzátu). Roztok se nalil na kruhovou silikonovou desku a film vznikl odpařením vodné fáze při 30 oC za 72 hodin. Film se kondicionoval 5 dnů v exsikátoru nad vysušeným silikagelem za pokojové teploty. Poté byly připraveny vzorky filmů o rozměrech 2x2 mm, které byly podrobeny termické analýze na diferenciálním skenovací kalorigramu (DSC 2010, TA Instruments, USA). Analýza byla provedena v otevřených hliníkových miskách za ochranné dusíkové atmosféry při průtoku 150 ml.min<sup>-1</sup> v teplotním intervalu 20 až 350 oC s teplotním gradientem dT/dt = 15 oC.min<sup>-1</sup>. Z DSC křivek byly stanoveny fázové přechody: uvolňování sorbované vody (Tv), uvolňování strukturálně vázané vody (Ts), skelný přechod (Tg), tání (Tm), rozklad (Tr). Bylo zjištěno, že k uvolňování sorbované (volné) vody dochází v rozmezí teplot 80-100 oC a strukturálně vázaná voda se uvolňuje při 146-159 oC. V závislosti na množství síťovadla se Tg pohybuje od 182 oC (v případě 0 % přísadky DAS) až do 201 oC (v případě 10 % přísadky DAS). Teplota tání oscilovala mezi 232-247 oC. K rozkladu dochází při teplotách nad 306 oC. DSC křivky s vyznačením fázových přechodů jsou znázorněny na obrázku. Fázové přechody jsou důležitými tepelnými charakteristikami posuzovanými při termoplastifikačním zpracování proteinů.

Autoři děkují MŠMT Č. R. za finanční podporu formou grantu MSM No. 7088352102.

- [1] Thomas Karbowski, T. et al. Influence of thermal process on structure and functional properties of emulsion-based edible films. *Food Hydrocolloids.* 2007, 21, 879-888.
- [2] De Carvalho, R. A. and Grosso C. R. F. Characterization of gelatin based films modified with transglutaminase, glyoxal and formaldehyde. *Food Hydrocolloids.* 2004, 18, 717-726.



Průběh DSC křivek filmů v závislosti na přídatku dialdehydu škrobu (DAS).

### 3Po-Ut7

#### PREPARATION AND ANTIMYCOBACTERIAL ACTIVITY OF HYDRAZONOFORMAMIDE DERIVATIVES OF ISONIAZID

J. MONREAL FÉRRIZ<sup>1</sup>, J. VINŠOVÁ<sup>2</sup>, A. IMRAMOVSKÝ<sup>2</sup>, E. VAVŘÍKOVÁ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Karlova v Praze, Farmaceutická fakulta

<sup>2</sup>Univerzita Karlova, Farmaceutická fakulta

Korešpondenčný autor: ferriz@faf.cuni.cz

Isoniazid (INH) and pyrazinamide (PZA) are widely applied as first-line drugs for the treatment of tuberculosis, usually in combination with other drugs. Modifying either of these molecules has been a challenge taken up several research groups<sup>1</sup>.

In the quest for biologically more potent anti-tuberculosis compounds we have designed and synthesized new derivatives that contain isoniazid and some other moieties linked by the CH group. This new type of molecule can be regarded as a “double active” molecule that can play the role of a prodrug with a prolonged liberation. In addition, the components involved in it may act synergistically<sup>2</sup>.

The first step was the synthesis of the hydrazone **1** that is easily available from INH and diethoxymethyl acetate (DEMA).<sup>3</sup>

The ethoxy group in compound **1** can be substituted by nitrogen nucleophiles like INH, PAS, some quinolones or sulfonamides etc. (**2**) to form products containing INH and some other conventional drug bonded by the CH group (**3**).

The mentioned products (**3**) were tested *in vitro* for their antitubercular activity at The National Reference Laboratory for *Mycobacterium kansasii*. The stabilities of these compounds were tested by means of a RP-HPLC method due to their decomposition in water-acetonitrile solution.

These compounds show very good activity against non tubercular strains in comparison with isoniazid as an in-

ternal standard. In view of this fact, active research of this topic continues.

This work was financially supported by the

Research project MSM 002162082 and GAUK 285/2006/B-CH/FaF.

[1] Vinsova J., Imramovsky A., Jampilek J., Ferriz M. J., Dolezal M.: *Curr. Med. Chem.* (2007) under review.

[2] De Logu A., Onnis V., Saddi B., Congiu C., Schivo M. L., Cocco M. T.: *J. Antimicrob. Chemother.* 49, 275 (2002).

[3] Košmrlj B., Koklič B., Polanc S.: *Acta Chim. Slov.* 43, 153 (1996).

### 3Po-Ut8

#### DEVELOPMENT OF REGIOSELECTIVE ENZYMATIC FERULOYLATION OF SIMPLE SACCHARIDES

Z. MORÁVKOVÁ, M. MASTIHUBOVÁ

Dept. of Glycochemistry, Institute of Chemistry, Center for Glycomics, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, SK-845 38 Bratislava

Korešpondenčný autor: chemoraz@savba.sk

Saccharides carrying 4-hydroxycinnamic fragments through an ester linkage belong to biologically active components isolated from plant cell walls. Dimers of 4-hydroxycinnamates cross-link cell wall polysaccharides [1]. Recently, a growing interest had evolved in regioselective acylation of saccharides by ferulic (4-hydroxy-3-methoxycinnamic) acid for studies of model cell walls fragments, biologically active agents in food, cosmetic and pharmaceutical industry or monomers for material chemistry. The functionalisation of unprotected saccharides by direct base-catalysed acylation affords obviously a mixture of polysubstituted derivatives. More regioselective acylations require protection, esterification and deprotection steps typical for classic sugar chemistry. This problem may be avoided by introduction of biocatalytic procedures possessing high degree of regioselectivity in the acylation of polyhydroxylated substrates. Feruloyl esterases [E.C. 3.1.1.73] represent a group of enzymes able to hydrolyse ester bonds between hydroxycinnamic acids and sugars present in plant cell walls [2].

Recently, our group published results on screening of a scale of commercial enzyme preparations exhibiting feruloyl esterase activity for catalysis of feruloylation of different glycosides in organic solvents [3]. This contribution presents our results from enzymatic *trans*-feruloylation by two lipases from *Thermomyces lanuginosus* using a scale of reducing monosaccharides and non-reducing disaccharide (sucrose) as acceptors. Vinyl

ferulate was used as a donor. NMR analysis of products showed that feruloylation proceeded on primary hydroxyls of saccharides. The insolubility of free saccharides and decreased activity of esterases in organic solvents had provoked search for convenient aprotic polar organic solvents, cosolvents or another unconventional conditions. The regioselectivity and yields of studied process will be discussed.

*This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-51-032502 and by the bilateral project Štefánik No. SK-FR-02206.*

- [1] Faulds C.B., Williamson G. J.: *Sci. Food Agric.* 79, 393 (1999).
- [2] Crepin V. F., Faulds C. P., Connerton I. F.: *Appl. Microbiol. Biotechnol.* 63, 647 (2004).
- [3] Mastihubová M, Mastihuba V., Bilaničová D., Boreková M.: *J. Mol. Catal. B: Enzymatic* 38, 54 (2006).

### 3Po-Ut9

#### AROMATIC NITROXIDES AND ALKOXYAMINES FOR LFRP. SYNTHESIS AND MOLECULAR MODELING.

J. MOSNÁČEK, J. KOLLÁR, J. KRONEK, D. RAČKO, C. KÓSA, M. DANKO

*Ústav polymérov, Slovenská Akadémia Vied, Dúbravská cesta, SK-84236 Bratislava, Slovenská republika*

Korešpondenčný autor: *upolmosj@savba.sk*

The influence of various electron-donating and electron-withdrawing substituents in a structure of nitroxide on the stability of nitroxyl radical in the case of aromatic nitroxides and their alkoxy derivatives was studied. Due to direct conjugation of substituents with various electron effects with free electron pair of nitrogen, marked electron influence of the substituents on the nitroxide properties is expected (positive or negative influence depending on the character of substituent).

Conjugated acyclic aryl amine derivatives, *N*-(4-methylphenyl)-*N*-(2-methyl-1-phenylpropyl)amine and *N*-(4-methoxyphenyl)-*N*-(2-methyl-1-phenylpropyl)amine, have been synthesized and oxidized [1]. Chemical and photochemical oxidation of the prepared amines, however, gives instable nitroxides. Decomposition of methoxy derivative gives isopropyl(phenyl)ketone and bis(4-methoxyphenyl)diazene-1-oxide as major decomposition products.

Derivatives of *N*-hydroxy pyrol were also synthesized. Oxidation of *N*-hydroxyl-2,5-ditertbutyl-3,4-diethoxycarbonyl pyrol gives stabile nitroxide.

The prepared nitroxides and alkoxy derivatives will be tested as initiators for LFRP.

In connection with the new structures of initiators we have investigated the influence of substituents on the molecular stability by means of molecular modeling methods employing quantum mechanical methods. The influence of a series of electron-donors and electron-acceptor substituents was examined. The bond energies increase in the following relation depending on a substituent **R**:  $\text{Me}_2\text{N} \ll t\text{-Bu} \leq \text{Me} \leq \text{MeO} \leq \text{AcO} \leq \text{F} < \text{Br} < \text{CN} \ll \text{NO}_2$ . Based on the calculated geometries it can be observed that the torsional angle between the substituted phenyl and the nitroxyl group corresponds to a planar structure, confirming existence of a chemically conjugated system.

*The authors thank to APVT grant agency for the financial support of this work through project No. 51-004904.*

- [1] Cs. Kósa, J. Mosnáček, A. Bílesová, P. Kasák, J. Kronek, M. Danko, J. Kollár, *Coll. Czech. Chem. Comm.* in press.

### 3Po-Ut10

#### ŠTÚDIUM MORFOLÓGIE A ELEKTRICKÝCH VLASTNOSTI POLYPYROLU PRIPRAVENÉHO V PRÍTOMNOSTI SÍRANU CERIČITÉHO

K. MRAVČÁKOVÁ, M. OMASTOVÁ

*Ústav polymérov, Slovenská Akadémia Vied, Dúbravská cesta, SK-84236 Bratislava, Slovenská republika*

Korešpondenčný autor: *upolkaty@savba.sk*

Vodivý polypyrol (PPy) bol syntetizovaný chemickou oxidačnou polymerizáciou pyrolu vo vodnom prostredí obsahujúcom nový oxidant, síran ceričitý, a povrchovo aktívnu látku (tenzid). Aniónové tenzidy: dodecylbenzénsulfonová kyselina (DBSA) a jej sodná soľ (DBSNa), boli prítomné v polymerizačnej zmesi ako aditíva. PPy polymerizovaný pri rôznych mólarných pomeroch oxidant/pyrol, od 0,5 do 3, bol charakterizovaný elementárnou analýzou, röntgenovou fotoelektrónovou spektroskopiou (XPS), termogravimetrickou analýzou. Morfológia pripravených produktov sa študovala pomocou riadkovej elektrónovej mikroskopie (SEM).

Na základe výsledkov meraní elektrickej vodivosti bol stanovený optimálny mólarny pomer, pri ktorom sa uskotočnili ďalšie syntézy PPy v prítomnosti aniónových tenzidov. Mólarny pomer tenzid/pyrol sa pohyboval v rozmedzí od 0,05 do 0,5.

Výsledky elementárnej analýzy a XPS dokazujú, že aniónová časť tenzidu sa pri polymerizácii zabudováva do štruktúry PPy podobne ako dopujúci anión. Vodivosť PPy syntetizovaného v prítomnosti tenzidu (DBSA,

DBSNa) je podstatne vyššia v porovnaní s hodnotou vodivosti PPy pripraveného len v prítomnosti oxidačného činidla v polymerizačnej zmesi. SEM štúdium preukázalo, že prítomnosť aniónového tenzidu silne ovplyvňuje morfológiu polymérneho produktu.

Prezentované výsledky sú súčasťou riešenia grantu VEGA 2/7103/27.

- [1] M. Omastová, M. Trchová, J. Kovárová, J. Stejskal, *Synth. Met.* 138, 3 (2003) 447.

### 3Po-Ut11

#### REAKCE ŽLUČOVÝCH KYSELIN V MIKROVLNNÉM PROSTŘEDÍ: SELEKTIVNÍ DEFORMYLACE TRI-O-FORMYLCHOLOVÉ KYSELINY

T.H. NGUYEN THI<sup>1</sup>, D. ROČKOVÁ<sup>2</sup>, P. DRAŠAR<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Přírodovědecká fakulta, UJEP v Ústí nad Labem

<sup>2</sup>UJEP

<sup>3</sup>VŠCHT Praha

Korešpondenčný autor: [nguyen@sci.ujep.cz](mailto:nguyen@sci.ujep.cz)

Od 80. let minulého století, kdy byl zjištěn významný vliv mikrovlnného záření na rychlost a selektivitu reakcí organických sloučenin, značně vzrostl počet publikací týkajících se reakcí v mikrovlnném prostředí. Mikrovlnnou chemií se už mnoho let zabývá i na naší katedře<sup>2</sup>, zde máme k dispozici chemický mikrovlnný reaktor Plasmatronika. V této práci jsme se zaměřili selektivní deformylaci tri-O-formylcholové kyseliny v mikrovlnném prostředí, jíž produkt po následné oxidaci uvolněné hydroxyskupiny slouží jako výchozí látka pro syntézu spiroanelovaných tetrapyrrolových derivátů na bázi žlučových kyselin. V literatuře byla tato reakce popsána jako neselektivní<sup>3</sup>, při našich pokusech se ukázala jako nejlepší reakční podmínka s maximální selektivitou je reakce v propan-2-olu, doba ozařování 4 min při výkonu 50%, tj. 350W s výtěžkem 86%. Práce na projektu byla financována grantem GA ČR 203/06/0006.

- [1] Loupy A., Ed.: *Microwaves in Organic Synthesis*, 2nd edition. Wiley-VCH 2006. ISBN: 3-527-31452-0
- [2] Šauliová J., Ryndová J.: *Mikrovlny v laboratorních cvičení z organické chemie*. Skripta UJEP 2003.
- [3] Dayal B., Rao K., Salen G.: *Steroids*. 60, 453, (1995).

### 3Po-Ut12

#### POROVNANIE EFEKTIVITY RÔZNYCH PLNÍV NA BÁZE MONTMORILLONITU PRE TERMOPLASTICKÚ A ELASTOMÉRNÚ MATRICU

Z. NÓGELLOVÁ<sup>1</sup>, J. HRACHOVÁ<sup>2</sup>, I. CHODÁK<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústav polymérov, Slovenská Akadémia Vied, Dúbravská cesta, SK-84236 Bratislava, Slovenská republika

<sup>2</sup>Ústav anorganickej chémie SAV, Bratislava

Korešpondenčný autor: [upolnoge@savba.sk](mailto:upolnoge@savba.sk)

Vrstevnaté silikáty sa často využívajú pre prípravu nanokompozitov s polymérovou matricou. Ich efektívnosť z hľadiska úpravy mechanických vlastností závisí od schopnosti vytvárať interkalované, prípadne exfoliované štruktúry. Tento efekt sa dosahuje vhodnou modifikáciou plniva so súčasnou hydrofobizáciou povrchu častíc.

V našej práci sme použili tri typy nemodifikovaného plniva, a to dva typy bentonitu s rôznou veľkosťou častíc (BJ40 pod 40 μm a J10 pod 10 μm), ďalej plnivo Kunipia-F (Kunimine Industries Co., Ltd., Japonsko) a organomodifikovaný Nanofil 15 (15 μm) s hydrofóbnou modifikáciou povrchu (Süd-Chemie, Nemecko). Preverili sa matrice LDPE (Bralén RA 2-63, Slovnaft, SR) ako nepolárny termoplast, ionomérny kopolymér polyetylén-co-kyselina akrylová (Nucler HC 1202, DuPont) ako polárny termoplast, ktorý by mohol samotný interkalovať i do štruktúr nemodifikovaného plniva a napokon elastomér SBR kaučuk (Krallex 1500, Kaučuk Kralupy, ČR).

Kompozity sa hodnotili na základe mechanických vlastností. Z hľadiska vplyvu typu plniva, závislosti pevnosti a ťažnosti od koncentrácie plniva boli pre bentonity a Nanofil v koncentračnom rozsahu do 10 hm.% podobné, charakterizované miernym poklesom oboch parametrov, zatiaľ čo prídavok Kunipie spôsobil podstatne strmší pokles najmä na začiatku pri 2 hm.% plniva. V SBR účinnosť Kunipie bola opäť najnižšia, vo všeobecnosti prídavok plniva spôsobil rast pevnosti i ťažnosti, na rozdiel od termoplastických matric. Zmeny sledovaných parametrov pre oba termoplasty boli prakticky totožné, ak sa do závislosti vyniesli relatívne hodnoty vzhľadom na hodnoty pre matricu bez plniva. Tento trend sa potvrdil pre všetky plnivá s výnimkou kompozitov plnených Kunipiou, kde relatívna pevnosť i ťažnosť pre kompozity s matricou ionomér Nucler vykazovali vyššie hodnoty v porovnaní s LDPE.

Táto práca je podporovaná projektom APVV č. 51-050505

**3Po-Ut13****AMIDY ŽLUČOVÝCH KYSELIN VYTVOŘENÉ Z RŮZNÝCH AMINŮ**

Z. NOVÁKOVÁ

*Vysoká škola chemicko-technologická Praha*Korešpondenčný autor: *zdena.novakova@vscht.cz*

Žlučové kyseliny jsou konečným produktem metabolismu cholesterolu v játrech. V přírodě nejrozšířenější žlučové kyseliny jsou deriváty kyseliny cholové nebo cholan-24-ové kyseliny. Hlavním znakem jejich struktury je steroid s  $5\beta$  anelací a nejméně jednou  $\alpha$  orientovanou hydroxyskupinou.

Byla zveřejněna schopnost některých žlučových kyselin, substituovaných aromatickými donory na pozici 3, vytvářet gel z určitých organických rozpouštědel<sup>1,2</sup>.

Cílem naší práce je syntéza amidů žlučových kyselin a jejich následné testování na potenciální gelační schopnosti. Příprava vychází z publikované literatury<sup>1</sup>, postupně byla optimalizována a zjednodušena především díky využití činidla pro peptidovou syntézu, tzv. TOTU (*O*-[(Ethoxykarbonyl)kyanomethylenamino]-*N,N,N',N'*-tetramethyluronium tetrafluoroborát).

Reakce vychází z kyseliny lithocholové **1b**, deoxycholové **1a**, zavedením chránicích skupin na volné hydroxyly (**2a**, **2b**), následnou reakcí s aminem (**3a**, **3b**) a končí odstraněním formiátových skupin ze steroidního řetězce za vzniku amidů **4a**, **4b**. Reakce byly prováděny i s kyselinou dehydrocholovou **5**. Některá amidy byly komplexovány s kovy.

Příklady používaných aminů: 5-amino-1,10-fenanthrolin, anilín, oktadecylamin, 5-aminofenanthren, 1-(2-aminofenyl)pyrol..

*Práce byla podporována projekty MŠMT MSM6046137305, 1P04OCD31.001, NVP-II Suprařst a GA ČR 203/06/0006.*

[1] Dukh M., Šaman D., Kroulík J., Černý I., Pouzar V., Král V., Drašar P., *Tetrahedron* 2003, 59, 4069.

[2] Virtanen E., Kolehmainen E., *Eur. J. Org. Chem.* 2004, 16, 3385.

**3Po-Ut14****VLASTNOSTI KOMPOZITOV SiC/POLYPYROL PRIPRAVENÝCHCH V PRÍTOMNOSTI ANIÓNOVÝCH TENZIDOV**M. OMASTOVÁ<sup>1</sup>, M. MIČUŠÍK<sup>1</sup>, M. TRCHOVÁ<sup>2</sup>, P. FEDORKO<sup>3</sup>, M.M. CHEHIMI<sup>4</sup><sup>1</sup>Ústav polymérov, Slovenská Akadémia Vied, Dúbravská cesta, SK-84236 Bratislava, Slovenská republika<sup>2</sup>Ústav makromolekulární chemie, Akademie věd České republiky, Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6<sup>3</sup>Fakulta chemické a potravinářské technologie STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava<sup>4</sup>ITODYS, Université Paris 7-Denis Diderot 75005 ParisKorešpondenčný autor: *upolmaom@savba.sk*

Polymerizáciou pyrolu použitím karbidu kremíka (SiC) ako anorganického substrátu, s a bez prítomnosti aniónového tenzidu, boli pripravené vodivé kompozity SiC/polypyrol s rôznym obsahom vodivej zložky. Skúmanie morfológie elektrickej vodivosti takto pripravených kompozitov bolo pokračovaním našej predchádzajúcej štúdie [1], v ktorej sa pokrývali submikročastice alfa - SiC polypyrolom bez akýchkoľvek prísad. Ako aniónový tenzid počas polymerizácie pyrolu sa použila dodecylbenzénsulfónová kyselina (DBSA). Povrch modifikovaných SiC sa upravoval vo vodnej suspenzii substrátu chemickou oxidačnou polymerizáciou pyrolu použitím chloridu železitého ako oxidantu.

Chemické zloženie povrchu bolo určené pomocou röntgenovej fotoelektrónovej spektroskopie (XPS) a meraním elektrickej vodivosti. Prítomnosť DBSA v DBSA-obsahujúcich kompozitoch bola potvrdená XPS meraniami, ktoré jednoznačne detegovali charakteristické píky pre DBSA, S2p a S2s lokalizované pri 168 eV a 231 eV. Vodivosť SiC-DBSA/PPy kompozitov obsahujúcich 15 hm.% PPy a pripravených použitím molárneho pomeru pyrol/DBSA = 7 je okolo  $1 \text{ S cm}^{-1}$ , čo je o 3 rády vyššia vodivosť než v prípade kompozitov pripravených bez prítomnosti DBSA.

Aniónový tenzid vytvára dôležité stavebné súčasti nového typu SiC/PPy kompozitu s kontrolovanou chémiou povrchu a vysokou elektrickou vodivosťou.

*Táto práca bola finančne podporená Vedeckou a grantovou agentúrou Ministerstva školstva SR a Slovenskej akadémie vied (VEGA 2/7103/27 a VEGA 1/2021/05).*

[1] M. Omastová, K. Boukerma, M. M. Chehimi, M. Trchová, *Mat. Res. Bull.* 2005, 40, 749.

[2] M. Mičušík, M. Omastová, M. Trchová, P. Fedorko, M. M. Chehimi, *Pol. Engn. Sci.* 2007, v tlači.

**3Po-Ut15****SYNTÉZA A ANTIMYKOBAKTERIÁLNI AKTIVITA 2-ALKYLSULFANYL A 2-FENYLSULFANYLFENYLGUANIDINŮ.**K. PALÁT<sup>1</sup>, G. BRAUNEROVÁ<sup>2</sup>, J. KAUSTOVÁ<sup>3</sup>, U. MÖLLMANN<sup>4</sup>, H.M. DAHSE<sup>4</sup><sup>1</sup>Universita Karlova, Farmaceutická fakulta<sup>2</sup>Farmaceutická fakulta Univerzity Karlovy, Katedra anorganické a organickej chemie, Heyrovského 1203, CZ-500 05 Hradec Králové<sup>3</sup>Národní referenční laboratoř pro *Mycobacterium kansasii*, Zdravotní ústav se sídlem v Ostravě



<sup>4</sup>Leibniz Institute for Natural Product Research and Infection Biology - Hans Knoell Institute, Beutenberg-Str. 11a, D-07745 Jena

Korešpondenčný autor: palat@faf.cuni.cz

Několikastupňovou syntézou vycházející z 2-substituovanýchnitrobenzenů [1,2,3] byla připravena série titulních látek (viz Schéma I).

Připravené sloučeniny byly podrobeny testování na aktivitu proti následujícím kmenům mykobakteria: *M. tuberculosis* (My 331/88), *M. kansasii* (My 235/80 a My 6509/96) a *M. avium* (My 330/88).

Sloučeniny s alkylsulfanylsubstitucí s délkou řetězce C<sub>7</sub>-C<sub>16</sub> vykazují dobrou antimykobakteriální aktivitu, která se blíží proti kmenům *M. tuberculosis* (My 331/88) a *M. kansasii* (My 6509/96) aktivitě standardu, kterým byl isoniazid. Aktivita těchto látek proti kmenům *M. kansasii* (My 235/80) a *M. avium* (My 330/88) je výrazně vyšší než účinnost standardu. Sloučeniny s kratším řetězcem, s benzylsulfanylovým řetězcem a s fenylsulfanylsubstitucí vykazují daleko nižší antimykobakteriální účinnost. Vybrané látky byly též otestovány na antiproliferativní a cytotoxickou aktivitu.

Práce byla podpořena výzkumným záměrem MSM 0021620822 a grantem GAUK 299/2006/B-CH/FaF.

- [1] Bellamy F. D., Ou K.: Tetrahedron Lett. 25, 839 (1984).
- [2] Ferry C. W., Buck J. S., Baltzly R.: Org. Syn. 22, 31 (1942).
- [3] Braunerová G.; Buchta V.; Silva L.; Kuneš J.; Palát K.: Farmaco, 59, 443 (2004).

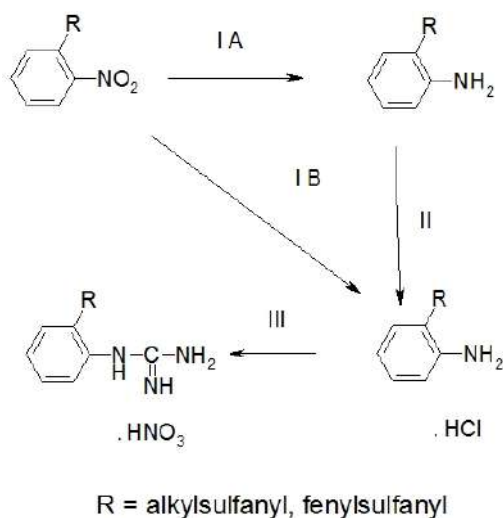


Schéma 1. I - chlorid cínnatý IA[1], IB[2]; II - chlorovodík, III - 1. kyanamid[3]/2. kyselina dusičná

### 3Po-Ut16

#### THE CROSS-LINKING POLYMERIZATION OF SELECTED N-SUBSTITUTED BIS ACRYLAMIDES DEFINED FOR DENTISTRY RESTORATIVE COMPOSITES.

J. PAVLINEC<sup>1</sup>, N. MOSZNER<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ústav polymérov, Slovenská Akadémia Vied, Dúbravská cesta, SK-84236 Bratislava, Slovenská republika

<sup>2</sup>IVOCLAR-VIVADENT, AG

Korešpondenčný autor: upolpav@savba.sk

The thermosetting monomers bis-(N-ethylacrylamido)-ethylenglycol (1), N,N'-dimethyl-1,6-bis(acrylamido)-hexan (2), and N,N'-diethyl-1,3-bis(acrylamido)-propan (3) that meet the most requirements for dental filling materials were investigated on the polymerization reactivity. The cross-linking polymerization was followed in bulk by using the ampoules technique and gravimetry. Polymerizations exhibited an abnormal kinetic behavior. For the monomer 2 for example the 1.28 reaction order to AIBN initiator, and the polymerization overall activation energy 151 k J/mol between 50 to 75 °C were determined. The increasing temperature and decreasing initiator concentration favored an extent of double bonds consumption in forming the polymer network. At 75 °C and 0.0225 mol/L AIBN the residual un-saturation was under 2%, comparing to 9.9% at 50 °C. The monomer conversion-time dependences were complemented also with DSC recording the heat released during polymerization. The extension of peak time with decreasing the instant heat flow rate at this point sort the studied monomers according the reactivity in the following order: monomer 3 > 1 > 2. The polymer samples sol-gel analyses in ethanol allowed determined molecular weight Mc between network cross-links. Presence of micro-gel particles at the polymerization very beginning and the changes in chain conformation with temperature we consider as the way in which was affected the polymerization kinetics of these monomers.

This work has been funded by IVOCLAR VIVADENT, AG, Schaan, Liechtenstein

### 3Po-Ut17

#### SOFISTIKOVANÁ METODA VÝROBY 2,4-DICHLORBENZYLKYANIDU

J. BĚLUŠA<sup>1</sup>, J. ŠIMBERA<sup>2</sup>, P. PAZDERA<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Centrum pro syntézy za udržitelných podmínek a jejich management, Lučební závody Draslavka a.s. Kolín

<sup>2</sup>Masarykova univerzita, Přírodovědecká fakulta, Ústav chemie, Centrum pro syntézy za udržitelných podmínek a jejich management

Korešpondenčný autor: pazdera@hemi.muni.cz

2,4-Dichlorbenzylkyanid (DCBC) je důležitým ak-



tuálním meziproduktem pro výrobu derivátů 2-(2,4-dichlorfenyl)ethanaminu, strukturního motivu obsaženého v celé řadě fytoefektoricky účinných substancí.

Metody výroby DCBC nukleofilní substitucí např. halogenu kyanidovým anionem jsou popsány ve více než 50 původních sděleních a patentech.

Většina popsáných postupů přípravy substituovaných benzykyanidů je v zásadě podobná. Rozdíly jsou pouze v detailech provedení - v množství a poměru reaktantů, kdy kyanid je používán ve vícenásobném přebytku, dále ve formě použitého kyanidu, množství a typu použitých rozpouštědel, době varu směsi, popř. způsobem izolace a čištění produktu.

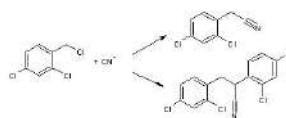
Z hlediska možností průmyslového využití výše zmíněných postupů je nevýhodou, že při většině z nich vzniká určité množství vodných vysoce toxických odpadů obsahujících zbytkový kyanid alkalického kovu.

Určité zlepšení postupů přípravy DCBC a jeho derivátů přinesla katalýza fázového přenosu při reakci benzyhalogenidů s kyanidy ve dvoufázových systémech kapalina - kapalina, resp. tuhá fáze - kapalina.

Při využití katalyzátorů fázového přenosu byly dosaženy výborné výtěžky produktů bez použití přebytku kyanidu. Přesto nelze tuto metodu považovat z technologického, ekonomického ani ekologického hlediska za dostatečně velký přínos ve srovnání s dosavadními postupy.

Dalším problémem obecně při uvedených syntézách je vznik vedlejších produktů, zejména substituovaných 2,3-difenypropannitrilů. Tyto v případě substituce fenylu benzyhalogenidu elektronakceptorními substituenty a v přítomnosti vody mohou být majoritním nežádoucím produktem syntézy. Vznikají z karbanionu vytvořeného z cílového benzykyanidu vlivem přítomného bazického kyanidu alkylací benzyhalogenidem.

V příspěvku bude popsána nová sofistikovaná metoda syntézy DCBC, která řeší všechny uvedené problémy, poskytuje cílový kyanid ve velmi vysokém výtěžku a čistotě, je provozně relativně velmi jednoduchá a levná. Při tom odpady nejsou kontaminovány zbytkovým kyanidem alkalického kovu, vznikající halogenidy alkalického kovu jsou z reakční směsi separovány v tuhé fázi. Použité rozpouštědlo je recyklováno a celkový organický odpad v množství cca 5% vstupních reagentů je likvidován ve spalovně nebezpečných odpadů.



Reakce 2,4-dichlorbenzykyanidu s kyanidovým anionem.

### 3Po-Ut18

## ADICE ALDEHYDŮ NA VISÍCÍ VINYLKAPALNÝCH POLYBUTADIENŮ

J. PODEŠVA, J. KOVÁŘOVÁ

Ústav makromolekulární chemie, Akademie věd České republiky, Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6

Korešpondenční autor: [podesva@imc.cas.cz](mailto:podesva@imc.cas.cz)

Nízkomolekulární polybutadieny, označované též jako kapalné kaučuky, zejména ty, které nesou reaktivní koncové skupiny (hydroxy, amino, kyano apod.), představují skupinu speciálních polymerů, které mohou sloužit jako meziprodukty při přípravě nových materiálů. Chemické modifikace kapalných polybutadienů prováděné na visících vinylech s cílem zavést určitou strukturu jako boční řetězec byly dosud realizovány zejména radikálovou adicí thiolu (např.<sup>1</sup>). Dále lze uvést hydrobromaci (např.<sup>2</sup>) následovanou reakcí s alkoholem nebo aminem. V našem příspěvku popisujeme další metodu, totiž radikálovou adici aldehydů na C=C vazbu, která je sice již dlouho známa pro jiné substráty (viz např.<sup>3</sup>), dosud však nebyla uplatněna pro případ visících vinylů polybutadienu. Cílem je nalézt podmínky této adice, které by umožnily adici složitějších aldehydů, připravených tak, aby jejich -CH=O skupina byla součástí struktury např. fenolického antioxidantu nebo piperidinového světelného stabilizátoru (HALS). Jako modelové aldehydy byly vybrány butanal a hexanal, jako kapalný polybutadien nestabilizovaný vzorek LBH 3000 z Kaučuku Kralupy a jako radikálový iniciátor jednak azoisobutyronitril, jednak dibenzoylperoxid. Reakce probíhá poněkud neochotně (ve srovnání např. s adicemi thiolů), při vyšších teplotách (při bodu varu příslušného aldehydu (tj. 75 °C, resp. 130 °C) a maximálně do cca 15 % konverze C=C skupin. Pomocí SEC byly zjištěno, že změny distribuce molekulových vah substrátu po adici nastávají (narůstající asymetrie na straně vyšších mol. vah), ale nejsou významné.

Příspěvek byl vypracován v rámci projektu č. 203/07/0987 podporovaného Grantovou agenturou ČR.

- [1] J. Podešva, J. Kovářová: *J. Appl. Polym. Sci.* 87, 885 (2003).
- [2] H. G. M. Edwards, A. F. Johnson, I. R. Lewis a M. A. MacLeod: *Polymer* 34, 3184 (1993).
- [3] M. S. Kharash, W. H. Urry, B. M. Kuderna: *J. Org. Chem.* 14, 248 (1949).

**3Po-Ut19****SYNTEZA NOVÝCH DERIVÁTŮ PACLITAXELU**M. PŘIBYLOVÁ<sup>1</sup>, M. DVOŘÁKOVÁ<sup>2</sup>, T. VANĚK<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Katedra Biochemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Albertov 6, Praha 2; Laboratoř rostlinných biotechnologií, Spojená laboratoř Ústavu experimentální botaniky AV ČR, v.v.i. a Výzkumného ústavu rostlinné výroby, v.v.i., Rozvojová 263, Pr*

<sup>2</sup>*Katedra organické a jaderné chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Albertov 6, Praha 2; Laboratoř rostlinných biotechnologií, Spojená laboratoř Ústavu experimentální botaniky AV ČR, v.v.i. a Výzkumného ústavu rostlinné výroby, v.v.i.,*

<sup>3</sup>*Laboratoř rostlinných biotechnologií, Spojená laboratoř Ústavu experimentální botaniky AV ČR, v.v.i. a Výzkumného ústavu rostlinné výroby, v.v.i., Rozvojová 263, Praha 6*

Korešpondenční autor: [pribylova@ueb.cas.cz](mailto:pribylova@ueb.cas.cz)

Paclitaxel je významné cytostatikum, jehož účinek na rakovinné buňky spočívá ve vazbě na mikrotubuly. Mikrotubuly jsou paclitaxelem stabilizovány a tím je zabráněno dalšímu buněčnému dělení. Paclitaxel je v dnešní době aplikován pacientům s rakovinou prsu, vaječníků a plic. Paclitaxel stejně jako ostatní cytostatika vykazuje mnoho vedlejších účinků např. hypersenzitivitu, hematologickou toxicitu, neurotoxicitu, má vliv na srdce a gastrointestinální trakt. Vedlejší účinky jsou spojeny i s látkou v níž je paclitaxel rozpuštěn při intravenózním podání pacientovi - Cremophoru EL.<sup>1</sup> Jednou z možností jak vedlejší účinky výrazně zmírnit, je tvorba cíleného derivátu cytostatika. Cílený derivát je složen z daného cytostatika, navigační molekuly a můstku, který obě části spojuje. Navigační molekula je biologicky aktivní látka, která má své receptory na specifické tkáni. Na těchto tkáních dochází k navázání molekuly cíleného cytostatika a jeho zakoncentrování pouze v dané oblasti. Tato skutečnost dává možnost snížení dávky léku. Molekula se do buňky dostává receptorem zprostředkovanou endocytózou. V buňce se cílený derivát rozpadá, uvolňuje se cytostatikum, které již účinkuje klasickým způsobem.

Na základě poznatků z předchozích syntéz bylo připraveno několik derivátů paclitaxelu splňující stavbu cytostatikum-můstek a cytostatikum-můstek-navigační molekula.<sup>2,3</sup> Deriváty byly připraveny modifikací hydroxylové skupiny na 2'uhlíku postranního řetězce paclitaxelu esterovou vazbou. Tato hydroxylová skupina se podílí při vazbě na mikrotubuly, proto je nutné, aby byla po vstupu do buňky esterová vazba hydrolyzována a hydroxylová skupina uvolněna. Tato představa byla

potvrzena měřením cytostatické aktivity. Cytostatická aktivita byla měřena jako hodnota IC<sub>50</sub> na vybraných tkáňových kulturách (Obr.).

grant IP04OC926.001

- [1] Suffnes M, CRC Press Inc., Taxol-science and applications, 1995
- [2] Synthetické deriváty taxolu, Vaněk T., Velek J., Starý I., Barth T., PV 2000-2817
- [3] Synthetické analogy taxolu, Vaněk T., Velek J., Starý I., Barth T., PV 2000- 2818

	IC50 (nmol/l)			
	L12 10	HL-60	HeLa S3	CCRF-CEM
Cílený derivát paclitaxelu	220	18	7 600	24
Paclitaxel	94	20	35	16

Cytostatická aktivita (IC<sub>50</sub>) molekuly cíleného derivátu paclitaxelu a paclitaxelu na vybraných tkáňových kulturách

**3Po-Ut20****SYNTEZA A CYTOTOXICKÁ AKTIVITA NĚKTERÝCH 3-SUBSTITUOVANÝCH 1,2-DIHYDRO-CHINOXALIN-2-ONŮ**N. PUDELOVÁ<sup>1</sup>, I. FRYŠOVÁ<sup>1</sup>, J. SLOUKA<sup>2</sup>, M. HAJDÚCH<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Katedra organické chemie, PŘF UP v Olomouci, Tř. Svobody 8, 771 46 Olomouc*

<sup>2</sup>*Univerzita Palackého Olomouc, Katedra organické chemie*

<sup>3</sup>*Laboratoř experimentální medicíny LF UP a Fakultní nemocnice v Olomouci, Puškinova 6, 775 20 Olomouc*

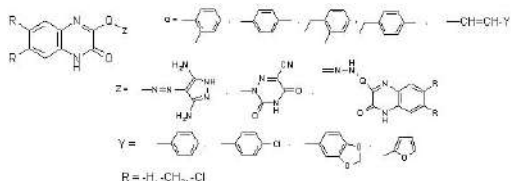
Korešpondenční autor: [pudelova.n@seznam.cz](mailto:pudelova.n@seznam.cz)

3-Substituované chinoxalin-2-ony patří mezi známé sloučeniny, přesto je jejich syntéza věnována stále velká pozornost [1]. V poslední době jsou některé deriváty této skupiny intenzivně studovány pro jejich biologickou aktivitu jako např. histaminové receptory [2], známé jsou také jako inhibitory angiogeneze [3]. Dosud byl relativně malý zájem věnován syntéze sloučenin nesoucích v poloze 3 nenasycený zbytek. Proto jsme se rozhodli zaměřit naši pozornost na tento typ sloučenin.

Řešená problematika je součástí náplně grantu MSM6198959216.

- [1] I. Fryšová, J. Slouka, T. Gucký, Chemistry of 1,2-dihydro-quinoxaline-2-ones in *Acta Universitatis Palackianae Olomouensis Facultas rerum naturalium* 42 (2003) 71-100, C.A. 142, 176729j (2005).

- [2] J. P. Edwards, J. D. Venable, Patent US 2005070527 (2005).
- [3] G. H. Ladouceur, B. Bear, Ch. Bi, D. R. Brittelli, M. J. Burke, G. Chen, J. Cook, J. Dumas, R. Sibley, M. R. Turner, Patent 2004043950 (2004).



### 3Po-Ut21

#### STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA POKROČILÉHO PREKURZORA PRE SYNTÉZU (+)-MYRIOCÍNU A JEHO ANALÓGOV

J. RASCHMANOVÁ<sup>1</sup>, M. MARTINKOVÁ<sup>2</sup>, J. KNAP<sup>1</sup>, J. GONDA<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Univerzita P. J. Šafárika, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Katedra organickej chémie, Moyzesova 11, 040 01 Košice

<sup>2</sup>University of P. J. Šafárik, Faculty of Natural Science, Institute of Chemical Science, Department of Organic Chemistry

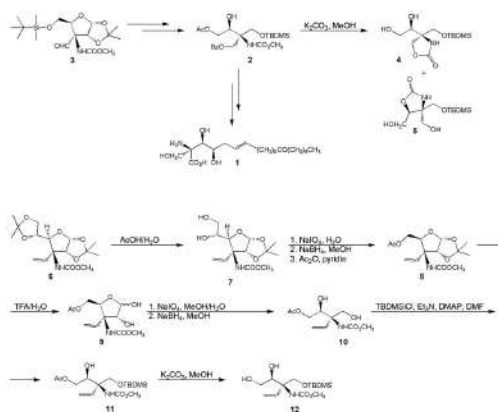
Korešpondenčný autor: jrasch@pobox.sk

Myriocín **1**, tiež známy ako termozymocidín alebo ISP-I, je neproteinogénna aminokyselina, ktorá sa vyznačuje zaujímavou štruktúrou a významnou biologickou aktivitou. Je účinným antibiotikom voči rôznym druhom plesní a kvasiniek, účinne potláča bunkovú imunitu a navyše spôsobuje aj apoptózu, pretože inhibuje aktivitu serínpalmitoyltransferázy.<sup>1</sup> V práci sú popísané stereoselektívne syntézy dvoch prekursorov **2** a **12** ako zaujímavých stavebných jednotiek vhodných pre prípravu **1** a jeho analógov. Ako východisková látka pre syntézu **2** bol použitý chirálny aldehyd **3**<sup>2</sup> odvodený od vhodne chránenej D-xylozy. Jedným z dôležitých reakčných krokov pre syntézu vedúcu k **1**, resp. jeho analógom, bola deacetylácia koncovej hydroxyskupiny u derivátu **2**. Avšak reakcia **2** s K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> poskytla neseparovateľnú zmes cyklických karbamátov **4** a **5** v pomere 1:1. Táto skutočnosť nás viedla k zmene syntetickej stratégie, pri ktorej bol ako štartujúci derivát použitý známy karbamát **6**<sup>3</sup> odvodený od modifikovanej D-glukózy. Selektívna hydrolýza 5,6-O-izopropylidénového kruhu **6** poskytla diol **7**, ktorý bol v troch reakčných krokoch: (1) diolové štiepenie s NaIO<sub>4</sub>, (2) redukcia s NaBH<sub>4</sub> a (3) acetylácia novovzniknutej hydroxyskupiny, transformovaný na derivát **8**. Otvorenie 1,2-O-izopropylidénového kruhu u derivátu **8** poskytlo neseparovateľnú zmes diastereoizomérnych laktolov **9**, ktorá následným štiepením s NaIO<sub>4</sub> a redukciovú vygenerovanú aldehydickej skupiny s NaBH<sub>4</sub> poskytla zodpovedajúci diol **10**. Selektívnou silyláciou primárnej hydroxyskupiny u **10** bola

pripravená látka **11**, ktorá po deacetylácii poskytla derivát **12** ako vhodný stavebný syntón obsahujúci požadované funkcionality, nevyhnutné pre prípravu myriocínu **1** a jeho analógov.

Tento príspevok vznikol s podporou Grantovej agentúry (No. 1/2472/05 a No.1/3557/06) Ministerstva školstva Slovenskej republiky, Agentúry na podporu výskumu a vývoja (APVV 20-038405) Slovenskej republiky a Vnútroštruktúry vedeckého grantového systému Prírodovedeckej fakulty UPJŠ (VVGS PF 14/2007/CH).

- [1] Byun, H.S.; Lu, X.; Bittman, R. Synthesis 2006, 15, 2447-2474.
- [2] Martinková, M.; Gonda, J.; Raschmanová, J. Molecules 2006, 11, 564-573.
- [3] Gonda, J.; Martinková, M.; Raschmanová, J.; Balentová, E. Tetrahedron: Asymmetry 2006, 17, 1875-1882.



Syntéza prekursora (+)-myriocínu a jeho analógov.

### 3Po-Ut22

#### SYNTHESIS AND POTENTIAL APPLICATION OF AMINO(BORONOPHENYL)METHYLPHOSPHONIC ACIDS AS RECEPTORS FOR AMINO ACIDS AND SUGARS.

A. RYDZEWSKA, P. MŁYNARZ, P. KAFARSKI

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

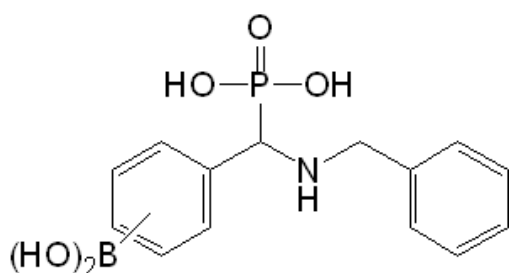
Korešpondenčný autor: agata.rydzewska@pwr.wroc.pl

Aminophosphonic as well as boronic acids exhibit very good coordinating properties towards biologically active compounds such as amino acids and carbohydrates. Boronic compounds are commonly known from their ability to bind sugars and their derivatives whereas phosphonic acids create molecular complexes with amino

acids [1,2]. The aim of this work is to obtain a new class of molecular receptors with multipoint recognition properties towards carbohydrates and amino (Scheme 1). This desired function might be fulfilled by employing both aminophosphonic moieties and boronic units in one molecule. Through this combination of binding units intermolecular interactions may be significantly extended.

*This work was financially supported by Polish Ministry of Education and Science (grant: R0501601).*

- [1] Renner, C.; Piehler, J.; Schrader, T., *J. Am. Chem. Soc.* 2005, 127, 1.  
 [2] Koolmeister, T., Sodergren, M., Scobie, M., *Tetrahedron Lett.* 2002, 43, 5965.



Scheme 1.

### 3Po-Ut23

#### NOVEL SYNTHESIS OF POLYCYCLIC REVERSIBLE INTERCALATORS AND THEIR BIOLOGICAL ACTIVITY

M. KOŽURKOVÁ<sup>1</sup>, D. SABOLOVÁ<sup>1</sup>, L. JANOVEC<sup>2</sup>, H. PAULÍKOVÁ<sup>3</sup>, P. KRISTIAN<sup>4</sup>, Z. VANTOVÁ<sup>5</sup>, M. BAJDICOVÁ<sup>3</sup>, J. IMRICH<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Univerzita P. J. Šafárika, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Košice

<sup>2</sup>Katedra Organickej Chémie, Ústav Chemických Vied, Prírodovedecká Fakulta, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika

<sup>3</sup>Department of Biochemistry and Microbiology, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak Technical University

<sup>4</sup>Department of Organic Chemistry, Institute of Chemistry, Faculty of Sciences, P. J. Šafárik University, Košice

<sup>5</sup>Department of Biochemistry, Department of Organic Chemistry, Institute of Chemistry, Faculty of Science, P. J. Šafárik University

Korešpondenčný autor: danica.sabolova@upjs.sk

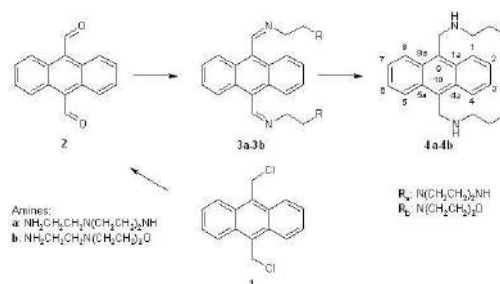
The interactions of small polycyclic molecules with nucleic acids have been the focus of enhanced interest for DNA complexes over the past decades (1-3). We have designed a modified synthetic method for the preparation of investigated N-substituted 9,10-bis(aminomethyl) anthracenes via corresponding aldimines **3a-3b**. Aldimines **3a-3b** after the reduction with NaBH<sub>4</sub> in

dry methanol afforded the final products 9,10-bis[[2-(piperazin-1-yl)ethyl]aminomethyl]anthracene hexahydrochloride (**4a**) and 9,10-bis[[2-(morpholin-4-yl)ethyl]aminomethyl]anthracene tetrahydrochloride (**4b**). Individual steps of the whole synthesis are depicted in the Scheme 1.

In our study we have characterized the drug binding mode on the basis of UV-Vis absorption spectroscopic analysis of the drug-DNA complexes and analysing the degrees of unwinding. We have found that studied anthracene compounds bind to DNA by intercalation mode. Reversibility of binding was observed for both intercalators, the unwinding angle was from 11 to 18 degrees. The inhibitory effects of compounds **4a-4b** against L1210 and HeLa tumour cell lines were tested and concentration-response curves plotted. The concentrations which produced 50% (IC<sub>50</sub>) inhibition of the cell viability were in range from 20 to 50 m M. The ability of **4a** and **4b** to inhibit proliferation of the cancer cells and its binding into DNA suggest that it could cause apoptosis.

*This work was supported by the Slovak Grant Agency VEGA, grants No., 1/2471/05, 1/3256/06, 1/4305/07 and the State NMR Programme (grant 2003SP200280203).*

- [1] K. Lemke, M. Wojciechowski, W. Laine, C. Bailly, P. Colson, M. Baginski, A. Larsen, A. Skladanowski, *Nucl. Acids Res.* 33 (2005) 6034-6047.  
 [2] D. Sabolová, M. Kožurková, P. Kristian, I. Danihel, D. Podhradský, J. Imrich, *Inter. J. Biol. Macromol.* 38 (2006) 94-98.  
 [3] L. Janovec, D. Sabolová, M. Kožurková, H. Paulíková, P. Kristian, J. Ungvarský, E. Moravčíková, M. Bajdichová, D. Podhradský, J. Imrich, *Bioconjugate Chem.* 18 (2007) 93-100.



## 3Po-Ut24

**THE BINDING AFFINITIES OF  
N-(9-ACRIDINYLTHIOCARBAMOYL)AMINO  
ACIDS WITH PLASMID DNA**

D. SABOLOVÁ<sup>1</sup>, M. KOŽURKOVÁ<sup>1</sup>, P. KRISTIAN<sup>2</sup>, I. DANIHEL<sup>2</sup>,  
N. TOMÁŠKOVÁ<sup>1</sup>, J. IMRICH<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Univerzita P. J. Šafárika, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických  
vied, Košice

<sup>2</sup>Department of Organic Chemistry, Institute of Chemistry, Faculty of  
Sciences, P. J. Šafárik University, Košice

Korešpondenčný autor: danica.sabolova@upjs.sk

Over a period of years, systematic studies on the DNA binding of new acridine derivatives, were carried out. Acridine and its derivatives are planar polycyclic aromatic molecules which bind tightly but reversibly to DNA by intercalation [1]. Intercalators are molecules that insert perpendicularly into DNA without forming covalent bonds [2] and are one of the oldest and most successful classes of bioactive agents.

In this work, the intercalation of N-(9-Acridinylthiocarbamoyl)amino acids (glycine (1), proline (2), leucine (3), histidine (4), phenylalanine (5) and tryptophan (6)) into plasmid DNA has been studied. UV-VIS spectrophotometry, fluorescence titration and quantum chemical calculation (AM1) have been used to analyze the molecular intercalation of N-(9-Acridinylthiocarbamoyl)amino acids into plasmid DNA (pUC 19).

The stability, kinetics of formation and geometry of intercalators-DNA complexes depend not only on the planar intercalating template, but also on the composition and structure of the bulky side groups.

The acridine thioureas (1-6) containing bulky substituents bind to DNA by one to two orders more efficiently compared with 9-Aminoacridine hydrochloride (7). The efficiency of binding was determined and found to increase in the order  $7 < 1 < 2 < 3 < 4 < 5 < 6$ . This fact can probably be attributed to the higher hydrophobicity of derivatives 1-6 due to the voluminous substituents at position 9 of the acridine skeleton. Fluorescence quenching in the fluorescence emission spectra suggested that acridine thioureas interact with DNA by intercalation. However, it is remarkable that there is not a direct dependence between the values of their binding constants and fluorescence intensities.

This work was supported by the Slovak Grant Agency VEGA, grants No., 1/2471/05, 1/3256/06 and APVT-20-006604.

- [1] M.F. Brana, M. Cacho, A. Gradillas, B. de Pascual-Teresa and A. Ramos, *Curr. Pharm. Des.*, 17 (2001), pp. 1745-1780.
- [2] R. Martínez and L. Chacón-García, *Cur. Med. Chem.*, 12 (2005), pp.1345-1359.

## 3Po-Ut25

**SPIROCYKLIZÁCIA 1-METOXYBRASINÍNU  
V PRÍTOMNOSTI SUBSTITUOVANÝCH  
ANILÍNOV**

A. SALAYOVÁ<sup>1</sup>, P. KUTSCHY<sup>1</sup>, M. ZBUROVÁ<sup>1</sup>, J. MOJŽIŠ<sup>2</sup>,  
M. PILÁTOVÁ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Univerzita P. J. Šafárika, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických  
vied, Katedra organickej chémie, Moyzesova 11, 040 01 Košice

<sup>2</sup>Univerzita P. J. Šafárika, Lekárska fakulta, Ústav farmakológie, SNP  
1, 040 66 Košice

Korešpondenčný autor: aneta.salayova@upjs.sk

Medzi rôznymi prírodnými spiroindolínovými zlúčeninami tvoria významnú skupinu fytoalexíny spiroindolín[3,5']tiazolínového typu prítomné v rastlinách čeľade *Kapustovité (Cruciferae)*.<sup>1</sup> Do tejto skupiny zlúčenín patria aj 1-metoxyspirobrasinol a 1-metoxyspirobrasinolmetyléter, ktorých syntéza vychádza z 1-metoxybrasinínu (1). Podstatou syntézy je vznik metoxyimíniového iónu 2 a jeho následné nukleofilné zachytenie vodou alebo metanolom.<sup>2</sup>

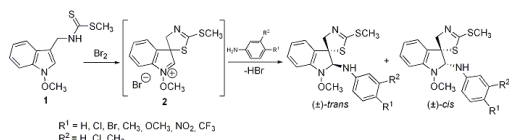
Táto stratégia bola využitá pri syntéze 2-aminoanalógov 1-metoxyspirobrasinolmetyléru, pričom ako nukleofilné činidlá boli použité substituované anilíny za vzniku diastereoizomérnych ( $\pm$ )-*cis*- a ( $\pm$ )-*trans*- produktov. Študovaný bol pomer vznikajúcich diastereoizomérov a tiež epimerizácia na uhlíku C-2 v kyslom prostredí.

Výber substituovaných anilínov je založený na Toplissovej schéme, ktorá na základe zmeny fyzikálnych (hydrofóbných, elektrónových a stérických) vlastností aromatických zlúčenín navrhuje syntézu látok s vyššou biologickou aktivitou vzhľadom k predlohovej štruktúre.<sup>3</sup>

Antiproliferatívna aktivita syntetizovaných zlúčenín bola sledovaná na bunkových líniiach leukémie, karcinómu prsníka, pl'úc a krčka maternice pri koncentrácii  $10^{-4}$  mol.l<sup>-1</sup> s použitím MTT testu. Všetky syntetizované aminoanalógy výrazne inhibovali rast nádorových buniek a najvyššia aktivita sa pozorovala pri *trans*-diastereoizoméri 3,4-dichlóranilínového analógu, ktorý inhiboval rast všetkých testovaných bunkových línii na 0-7% oproti kontrole.

Táto práca vznikla s podporou grantu VEGA, č. 1/3553/06

- [1] Pedras M. S. C., Zheng Q., Sarma-Mamillapalle V. K.: *Nat. Prod. Commun.* 2007, 2, 319.
- [2] Kutschy P., Suchý M., Monde K., Farada N., Marušková R., Čurillová Z., Dzurilla M., Míklošová M., Mezencev R., Mojžiš J.: *Tetrahedron Lett.* 2002, 43, 9491.
- [3] Topliss J. G.: *J. Med. Chem.* 1972, 15, 1006.

**3Po-Ut26****HYDROPHOBICALLY MODIFIED PECTATES - NOVEL FUNCTIONAL BIOPOLYMERS**

V. SASINKOVÁ<sup>1</sup>, A. MALOVÍKOVÁ<sup>2</sup>, Z. HROMÁDKOVÁ<sup>3</sup>, Š. MOZEŠ<sup>4</sup>, I. SROKOVÁ<sup>5</sup>, A. EBRINGEROVÁ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Chemický ústav SAV

<sup>2</sup>Center of Excellence of the Slovak Academy of Sciences, Institute of Chemistry; 845 38 Bratislava, Slovakia

<sup>3</sup>Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava

<sup>4</sup>Institute of Animal Physiology, Slovak Academy of Sciences, SK-040 01 Košice, Slovakia

<sup>5</sup>Faculty of Industrial Technologies, University of Alexander Dubček in Trenčín, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov

Korešpondenčný autor: chemsasi@savba.sk

Pectin is an inexpensive, non-toxic polysaccharide commercially produced from citrus peels and apple pomaces. It is widely used in the food industry as hydrocolloid additive with gelling and thickening properties as well as recognized as dietary fibre and useful in therapy of irritated mucous membranes of the respiratory tract and gastro-intestinal tissues [1].

In the frame of our recent research on polymeric surfactants citrus pectate with a part of carboxyl groups transformed into Cn-alkyl esters [2] or of citrus pectinate grafted with C<sub>4</sub>- and C<sub>6</sub>-alkylamino groups yielded amphiphilic polymers with tensio-active properties, useful in emulsion preparations of the 'oil in water' type. From citrus pectinate a novel series of pectate derivatives with some carboxyl groups transformed into C<sub>4</sub>- and C<sub>6</sub>-alkylamides was prepared by an environmentally friendly process, and characterized by structural, molecular and surface-active properties.

Preliminary studies on the effect of high methoxy (E=65%) citrus pectinate on the small intestine function of rats in relation to development of dietary obesity revealed an increase of enzyme activities associated with decreased food intake and utilisation. The results suggested that the pectin might play an important role in prevention of obesity on high fat diet.

*Acknowledgements*

This work was financially supported by the Slovak Grant Agency VEGA, grant No. 2/6131/6 and the SAS COST D28 and COST D29 actions.

[1] Thakur, B.R., Singh, R. K., Handa, A.K. Crit. Rev. Food Sci. Nutr., 37, 47-73 (1997)

[2] Malovíková, A., Hromádková, Z., Chmela, S., Janigová, I., Csomorová, K., Ebringerová, A. Proceeds. 2th European Carbohydrate Symposium, 6.-11.7.2003, Grenoble, France, PD031

**3Po-Ut27****PŘÍPRAVA KERATINOVÉHO HYDROLYZÁTU A STANOVENÍ NĚKTERÝCH JEHO CHARAKTERISTIK**

S. SUKOP<sup>1</sup>, P. MOKREJŠ<sup>2</sup>, F. BUŇKA<sup>3</sup>, V. KAŠPÁRKOVÁ<sup>3</sup>, K. KOLOMAZNÍK<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Fakulta technologická, Ústav chemie

<sup>2</sup>Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Fakulta technologická, Ústav inženýrství polymerů

<sup>3</sup>Univerzita T. Bati ve Zlíně, Ústav potravinářského inženýrství

<sup>4</sup>Univerzita T. Bati, Fakulta aplikované informatiky, Ústav automatizace a řídicí techniky, Nad Stráněmi 4511, 760 05 Zlín

Korešpondenčný autor: sukop@ft.utb.cz

Keratin jsou bílkoviny s vláknitou strukturou, mechanicky odolné a chemicky nereaktivní. Rovněž tak jsou odolné proti působení proteolytických enzymů. Keratiny  $\alpha$  a  $\beta$  se odlišují sekundární strukturou. Surovinou pro přípravu keratinového hydrolyzátu mohou být vlasy, štětina, srst, vlna, peří, nehty, kopyta, rohy a hedvábí. Pro strukturu vlněného vlákna (patřícího do  $\alpha$  keratinů) je významná přítomnost cystinu, který vytváří disulfidové vazby mezi jednotlivými řetězci. Tyto vazby mohou být štěpeny redukčním nebo oxidačním způsobem za vzniku rozpustné keratasy.<sup>1,3</sup>

Keratinový hydrolyzát byl experimentálně připraven z ovčí vlny jak modifikovaným redukčním tak oxidačním způsobem. Příprava hydrolyzátu modifikovaným redukčním způsobem spočívala ve dvoufázovém rozkladu ovčí vlny, kdy v první fázi bylo působeno 0,1M merkaptotetanolem (při 50<sup>0</sup>C po dobu 24h) a ve druhé fázi byla provedena enzymová hydrolýza enzymem Savinase Ultra 16L (60<sup>0</sup>C po dobu 24h)<sup>2</sup>. Příprava hydrolyzátu oxidačním způsobem byla provedena pomocí kyseliny peroctové (40<sup>0</sup>C po dobu 24h) a následným převedením systému do alkalické oblasti pomocí 30% roztoku amoniaku. Vlastní experimenty rozkladu vlny byly provedeny dvouúrovňovými faktorovými pokusy se dvěma sledovanými experimentálními proměnnými (pokusy 3<sup>2</sup>). Výsledky byly statisticky vyhodnoceny v programu Statgraphics verze 6.0 a byly stanoveny optimální podmínky rozkladu oběma způsoby.

Další experimentální práce byla zaměřena na stanovení běžných charakteristik připravených keratinových hydrolyzátů (sušina, popel, obsah síry). Hlavním cílem bylo stanovení aminokyselinového složení a molekulové hmotnosti připravených hydrolyzátů. Aminokyselinové složení hydrolyzátů bylo stanoveno na automatickém analyzátoru aminokyselin a molekulová hmotnost gelovou permeační chromatografií. Tyto charakteristiky je nutno

znát pro některé aplikace připravených keratinových hydrolyzátů. Předmětem navazujících výzkumů bude příprava a testování keratinových filmů.

Autoři děkují MŠMT ČR za finanční podporu formou grantu MSM No.7088352102 a 7088352101

- [1] Fahrenstock S.R., Steinbüchel A.: Biopolymers, Vol.8, kap.7, s.155. Wiley-VCH, Weinheim 2003.
- [2] Mokrejš P., et al: Chem.Listy, Vol.100, s.730, 2006.
- [3] Kiyoshi Yamauchi, et al: J.Biom.Mat.Res., Vol.31, s.439, 1996.

### 3Po-Ut28

#### ANTIOXIDAČNÁ ÚČINNOSŤ OSAJÍN, POMIFERÍNU A ICH SYNTETICKY PRIPRAVENÝCH IZOFORIEM

F. ŠERŠEŇ<sup>1</sup>, D. LOOS<sup>2</sup>, M. DVORSKÁ<sup>3</sup>, J. VANČO<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Chemický ústav

<sup>2</sup>Katedra organickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Mlynská dolina CH2, 842 15 Bratislava

<sup>3</sup>Ústav prírodných liečiv, Farmaceutická fakulta, Veterinárni a farmaceutická univerzita Brno, Palackého 1-3, 612 42 Brno,

<sup>4</sup>Ústav chemických liečiv, Farmaceutická fakulta, Veterinárni a farmaceutická univerzita Brno, Palackého 1-3, 612 42 Brno

Korešpondenčný autor: sersen@fns.uniba.sk

Osajin a pomiferin sú isoflavonoidy, ktoré obsahujú plody stromu *Maclura pomifera* [1]. Zistilo sa, že vyššie spomínané látky sú schopné inhibovať peroxidáciu lipidov [2,3] a vychytávať niektoré radikály a peroxonitrit [3].

Antioxidačná aktivita vyššie spomínaných látok bola sledovaná pomocou vychytávanie DPPH (v metanolovom a chloroformovom roztoku) a HO<sup>•</sup> radikálov vo vode. Antioxidačné vlastnosti študovaných látok sú vyjadrené buď hodnotami SC<sub>50</sub> (koncentrácia, pri ktorej dochádza k 50 % poklesu absorbancie pri 617 nm), alebo percentuálne (Tabuľka I). Z Tabuľky I je evidentné, že pomiferiny sú veľmi dobrými vychytávačmi DPPH radikálov pričom, *iso*-pomiferin je účinnejší ako pomiferin. Na druhej strane osajin a *iso*-osajin vykazovali nulovú účinnosť vychytávania DPPH radikálov v metanole. Z výsledkov je zrejmé, že tak osajiny ako aj pomiferiny sú schopné vychytávať DPPH radikály aj v chloroforme, pričom pomiferiny sú účinnejšími vychytávačmi ako osajiny. Na základe týchto zistení predpokladáme, že v aprotickom prostredí dochádza k vychytávaniu DPPH radikálov uvoľnením H<sup>•</sup>. V Tabuľke I sú tiež prezentované percenta účinnosti vychytávania HO<sup>•</sup> radikálov nasýtenými vodnými roztokmi študovaných látok. Z týchto hodnôt je vidieť, že osajin a pomiferin sú slabšími vychytávačmi HO<sup>•</sup> radikálov ako ich *iso* formy. Tento fakt podporuje

náš predpoklad, že vychytávanie radikálov osajinmi a pomiferinmi prebieha uvoľňovaním H<sup>•</sup> z ich molekúl.

Táto práca vznikla za podpory grantu MŠSR VEGA. 1/3411/06

- [1] Peterson C., Fristad A., Tsao R., Coats J.R.: Environ.Entomol., 29, 1133-1137, 2000
- [2] Veselá D., Kubínová R., Muselík J., Žemlička M., Suchý V.: Fitoterapia 75, 209-211, 2004
- [3] Hamed S.F., Hussein A.A.: Egyptian J. Chem. 47, 545-554, 2004

zlúčenina	osajin	iso-osajin	pomiferin	iso-pomiferin	poznámka
SC <sub>50</sub> (DPPH) [μmol dm <sup>-3</sup> ]	neúčinný	neúčinný	13.69	6.43	v metanole
SC <sub>50</sub> (DPPH) [μmol dm <sup>-3</sup> ]	475.9	279.1	6.57	16.98	v CHCl <sub>3</sub>
% vychytávania HO <sup>•</sup>	80	39	76	50	nas roztok v H <sub>2</sub> O

Tabuľka I. Účinnosti vychytávania DPPH a HO<sup>•</sup> radikálov

### 3Po-Ut29

#### SYNTÉZA A ANTIOXIDAČNÉ VLASTNOSTI N-(4-HYDROXYFENYL)AMIDU KYSELINY GALOVEJ

F. ŠERŠEŇ<sup>1</sup>, F. GREGÁŇ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Chemický ústav

<sup>2</sup>Univerzita Mateja Bela, Katedra chémie, Fakulta prírodných vied, Banská Bystrica

Korešpondenčný autor: sersen@fns.uniba.sk

Kyselina galová je organická kyselina, ktorá sa vyskytuje vo viacerých rastlinách napr. v: dubienke, medvedici lekárskej, dubovej kôre a čajových listoch. Kyselina galová má antimikrobiálne a antivirálné vlastnosti, používa sa tiež ako astringent. Kyselina galová pôsobí cytotoxicky voči rakovinovým bunkám bez poškodenia zdravých buniek [1].

Je známe, že mnohé fenolické látky, majú veľmi dobré antioxidačné vlastnosti, preto sme sa zaujímali aké antioxidačné vlastnosti bude mať zlúčenina, vytvorená z dvoch predstaviteľov fenolických látok. Ako modelový príklad sme vybrali kyselinu galovú a 4-aminofenol. Z literatúry je známe, že kyselina galová má veľmi dobré antioxidačné účinky. Na druhej strane je známe, že 4-aminofenol zapríčiňuje nefrotoxicitu, zatiaľ čo niektoré jeho deriváty vykazujú tiež antioxidačné vlastnosti [2].

Za tým účelom sme zosyntetizovali N-(4-hydroxyfenyl)amid kyseliny galovej. Syntézu tejto látky sme urobili mierne upravenou metódou opísanou *Sljusarevom a kol.* [3]. Stručne; do chladeného vodného (5-7°C) roztoku 4-aminofenolu s NaOH sme pomaly za neustáleho miešania prikvapkávali roztok kyseliny

galovej v bezvodom tetrahydrofuráne. Zmes sa ešte dve hodiny miešala pri 20 °C. Potom sa z reakčnej zmesi oddestiloval tetrahydrofurán a pridala sa kyselina chlorovodíková na pH = 3-4. V reakčnej zmesi sa vylúčila bezfarebná tuhá látka. Táto sa odfiltrovala, premyla vodou a prečistila sa kryštalizáciou z metanolu. Konečný produkt N-(4-hydroxyfenyl)amid kyseliny galovej mal teplotu topenia 280°C a jeho totožnosť bola potvrdená <sup>1</sup>H-NMR spektroskopiou.

Antioxidačnú účinnosť sme stanovovali spektrofotometricky vychytávaním DPPH radikálov v metylalkoholovom roztoku. Zistili sme nasledovné hodnoty SC<sub>50</sub> (koncentrácia, ktorá vychytá 50% DPPH radikálov): Kyselina galová 5,82; 4-aminofenol 17,41 a N-(4-hydroxyfenyl)amid kyseliny galovej 9,11 mikromol dm<sup>-3</sup>.

Táto práca vznikla za podpory grantov MŠSR VEGA. 1/3411/06 a 1/4467/07.

- [1] Ow, Y.-Y. and Stupans, I., *Curr. Drug Metab.* 4, 241, 2003
- [2] Takashi, N., Tamagawa, K., Kubo, Y., Fukui, T., Wakabayashi, H. and Honda T.: *Bioorg. Med. Chem.* 11, 3255, 2003
- [3] Sljusarev, A. T. and Gershuns, A.,L., *Ukr. Khim. Zh.* 26, 364, 1960

### 3Po-Ut30

#### 2,2-DINITROETHEN-1,1-DIAMIN (FOX-7), DYNAMIT 21. STOLETÍ?

K. DUDEK<sup>1</sup>, Z. JALOVÝ<sup>2</sup>, F. LIŠKA<sup>3</sup>, P. MAREČEK<sup>1</sup>, A. ŠILHÁNKOVÁ<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Explosia a.s., 530 02 Pardubice-Semtín

<sup>2</sup>Ústav energetických materiálov, FCHT, Univerzita Pardubice, 532 10 Pardubice

<sup>3</sup>Universita Karlova, Pedagogická fakulta UK v Praze, Katedra chemie a didaktiky chemie

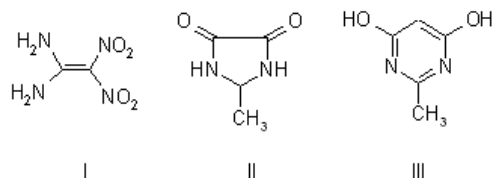
<sup>4</sup>Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav organické chemie, Technická 5, 166 28 Praha 6

Korešpondenčný autor: alexandra.silhankova@vscht.cz

Uvedený dinitrodiamin I, objavený pri nitrácii 2-methylimidazolu (1), se stal ihned predmetom zájmu teoretických i syntetických (2,3) chemiků. V súčasnej dobe existujú dva reálne využiteľné syntetické postupy (1,2). Prvni (1) vychází z nitrace 2-methylimidazolidin-4,5-dionu (II), druhý (2) z nitrace 2-methylpyrimidin-4,6-diolu (III). Postup z výchozího diolu III poskytuje FOX-7 ve výtěžcích až 95%, je však znevýhodněn tím, že při něm vzniká jako vedlejší produkt jedovatý a výbušný dinitromethan. Proto se úsilí syntetiků soustředuje na

optimalizaci první syntézy. V příspěvku budou zhodnoceny uvedené strategické přístupy, dále pokusy o alternativní syntézy (i když zpravidla neúspěšné), jakož i možnosti likvidace dinitromethanu z vyčerpané nitrací směsi odpadající při druhém postupu na ekologicky neškodné produkty.

- [1] Latypov N.V., Bergman J., Langlet A., Welmar U., Bemm U.: *Tetrahedron* 1998, 54, 11525.
- [2] Belamy A.J., Latypov N.V., Goede P.: *J. Chem. Research (S)* 2003, 5, 529.
- [3] Dorochov V.A., Gordějev M.F., Bogdanov V.S., Lajchtěr A.L., Kislyj V.P., Semenov V.V.: *Izv. Akad. Nauk, Ser. Chim.* 1990, 11, 2660.



### 3Po-Ut31

#### SYNTEZA C-GLYKOSYLOVANÝCH DIPYRRINŮ A JEJICH KOMPLEXŮ S KOVY

O. ŠIMÁK<sup>1</sup>, P. DRAŠAR<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav chemie přírodních látek

<sup>2</sup>VŠCHT Praha

Korešpondenčný autor: simako@vscht.cz

Konjugované dipyrroly (dipyriny) a jejich schopnost komplexovat různé kovy je známa od roku 1924, kdy byla publikována práce Fishera a Schuberta<sup>1</sup>. V ní jsou popsány první oxidace dipyrrolových systémů, které se před tím využívaly hlavně pro přípravu porfyrinů. Tyto látky mají stejně jako porfyriny schopnost vázat různé atomy kovů. Na rozdíl od planárních porfyrinů, kde kov zapadne do prostoru uvnitř porfyrinového jádra, jsou dipyrrolové jednotky orientovány na atomu kovu rovinami kolmo vůči sobě<sup>2</sup>.

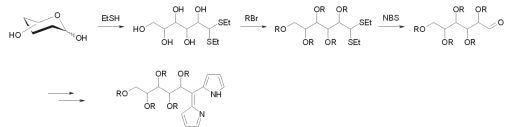
Tyto látky byly v minulosti využívány právě ve spojení s porfyriny<sup>3</sup> pro fotodynamickou terapii. Jejich absorpční maximum je posunuto oproti Soretovu pásu porfyrinů (400-420nm) do červeného spektra cca o 100 nm, což je výhodnější z hlediska využití v klinické praxi. Samotným dipyrinům ale chybí schopnost produkovat singletový kyslík. Jejich spojení s porfyriny posune absorpční maximum celé molekuly a zároveň při excitaci dojde k tvorbě singletového kyslíku.



Naše práce je zaměřena na přípravu, podrobný analytický popis dipyrinů substituovaných v *meso* poloze „C-glykosidy“. Dále pak jejich komplexace s dvoj- a trojmocnými kationy kovů a na zkoumání jejich případných samoskladných vlastností v roztoku. Sacharidová složka nám poskytne nejen chirální vektory pro naše látky, ale díky snadné derivatizaci hydroxylových skupin nám umožní získat látky se stejnou chiralitou, ale různou polaritou. Jejich porovnání z hlediska předpokládaných samoskladných vlastností v roztoku, by mohlo přispět k odhalení procesů, které se při tomto fenoménu uplatňují.

Práce byla provedena v rámci řešení výzkumného záměru MŠMT č. 6046137305, projektu IP04OCD31.001, grantu GAČR 2003/06/0006 a NVP-II SUPRAYFYT.

- [1] 1. Fischer H., Schubert M.: Ber. Dtsch. Chem. Ges. 1924, 57, 610.
- [2] 2. Cotton F. A., DeBoer B. G., Pipal J. R.: Inorg. Chem. 1970, 9, 783.
- [3] 3. Yu L., Muthukumar K., Sazanovich I. V., Kirmaier Ch., Hindin E., Diers J. R., Boyle P. D., Boccian D. F., Holten D., Lindsey J. S.: Inorg. Chem. 2003, 42, 6629.



### 3Po-Ut32

#### SYNTEZA A STRUKTURA NĚKTERÝCH AZOKOPULOVANÝCH CYKlickÝCH ENAMINONŮ

P. ŠIMŮNEK<sup>1</sup>, L. LUSKOVÁ<sup>1</sup>, M. SVOBODOVÁ<sup>1</sup>, V. BERTOLASI<sup>2</sup>, A. LYČKA<sup>3</sup>, V. MACHÁČEK<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Katedra organické chemie

<sup>2</sup>Università di Ferrara, Dipartimento di Chimica and Centro di Strutturistica Diffraattometrica

<sup>3</sup>Výzkumný ústav organických syntéz a.s. Pardubice

<sup>4</sup>Univerzita Pardubice

Korešpondenční autor: petr.simunek@upce.cz

Produkty azokopulace byly připraveny reakcí příslušných enaminonů odvozených od dimedonu, cyklopentan-1,3-dionu a indan-1,3-dionu se substituovanými

benzondiazonium-tetrafluoroboráty v dichlormethanu v přítomnosti octanu sodného [1,2]. Struktura takto připravených sloučenin byla studována v roztoku pomocí multinukleární magnetické resonance a v některých případech i v krystalu pomocí rentgenové difrakce. Bylo zjištěno, že cyklické enaminony se chovají za těchto podmínek zcela jinak než již dříve popsané deriváty odvozené od acyklických enaminonů [3]. V příspěvku budou diskutovány struktury jednotlivých připravených strukturálních typů a konfrontovány s již popsány strukturami.

Tato práce byla finančně podporována Ministertsvem školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (Projekt č. MSM 0021627501)

- [1] Šimůnek P., Lyčka A., Macháček V.: Eur. J. Org. Chem. 2002, 2764-2769.
- [2] Šimůnek P., Lusková L., Svobodová M., Bertolasi V., Lyčka A., Macháček V.: Magn. Reson. Chem. 2007, 45, 330-339.
- [3] Macháček V., Lyčka A., Šimůnek P., Weidlich T.: Magn. Reson. Chem. 2000, (39), 293-300.

### 3Po-Ut33

#### APLIKAČNÍ MOŽNOSTI MOLEKULÁRNÍHO MODELOVÁNÍ V HETEROGENNÍ KATALÝZE

J. ŠPLÍCHALOVÁ<sup>1</sup>, P. KAČER<sup>1</sup>, M. KUZMA<sup>2</sup>, L. ČERVENÝ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>VŠCHT Praha

<sup>2</sup>AV MBÚ Praha

Korešpondenční autor: splichalovajana@seznam.cz

Práce se zabývá studiem molekulárních vlivů při hydrogenačních reakcích v kapalně fázi na nosičových katalyzátorech. V rámci řešené problematiky bylo získáno značné množství kinetických dat z hydrogenací vhodně zvolených řad (z hlediska zvoleného strukturálního jevu) modelových substrátů, které byly vybrány z důvodu absence takovýchto dat v literatuře.

Získaná kinetická data byla následně interpretována s využitím metod molekulárního modelování, kde byly studovány modelové substráty pomocí semi-empirických a DFT výpočetních metod a povrch katalyzátoru byl uvažován jako konstantní prvek.

Tato „metoda dvojí zpětné vazby“ - kdy je experiment využíván k ověření teoretických výsledků a teoretické výsledky jsou použity pro objasnění experimentálně zjištěných dat - umožnila posouzení její vhodnosti k řešení různých strukturálních problémů.

Byly studovány 2 řady substrátů - nenasycené alkoholy a ketony. U nenasycených alkoholů byla použita metoda konkurenční hydrogenace jako metoda studia strukturálních vlivů. Tento přístup umožnil diskusi vlivu

molekulární struktury na rychlost povrchové reakce a stabilitu adsorbovaného komplexu. Studium ketonů umožnilo předpovědět vlastnosti hydrotalcitového katalyzátoru, který byl použit pro aldolizační reakce ketonů.

### 3Po-Ut34

#### STRUCTURE OF GLUCURONOXYLAN FROM SALVIA OFFICINALIS L.

P. CAPEK<sup>1</sup>, M. MATULOVÁ<sup>1</sup>, J. TURJAN<sup>2</sup>, G. NOSÁL'OVÁ<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava*

<sup>2</sup>*Chemický ústav SAV*

<sup>3</sup>*Department of Pharmacology, Comenius University, Martin*

Korešpondenčný autor: chemtur@savba.sk

*Salvia officinalis* L. (sage) is worldwide spread medicinal plant and used in traditional medicine and for culinary and cosmetics purposes. Sage disposes with a large scale of bioactive compounds. It has been shown to have the strongest antioxidant activity among herbs [1] and a high antitussive activity [2]. Besides, a crude hemicellulose fraction of sage was shown to have an immunomodulatory activity [3].

To isolate the hemicellulose fraction of sage, aerial parts of the plant were repeatedly treated with methanol - chloroform and the drug residue was extracted with cold water, ammonium oxalate, dimethylsulfoxid and 1 and 4 M potassium hydroxide. A crude hemicellulose fraction (1 M) was obtained in 4.6% yield by alkaline extraction, followed ethanol precipitation, dialysis and freeze-drying. Hemicellulose polysaccharide solubilized with 1M potassium hydroxide solution was rich mainly in xylose, arabinose and glucuronic acid while other sugars, i.e. galactose, glucose, mannose and rhamnose residues were present as minor components indicating the presence of arabinoglucuronoxylan. It was further purified to give a light brown polysaccharide material of  $M_w$  84 000. It was composed of xylose (81%), arabinose (10%), 4-O-methylglucuronic acids (8%) and small amounts (1%) of galactose, glucose, and mannose residues. The main structural features of the glucuronoxylan were deduced from the results of compositional and linkage analyses of the native polymer and oligomers generated on partial acid hydrolysis, <sup>1</sup>H and <sup>13</sup>C NMR measurements.

*The work was supported by VEGA 2/6131/26 and APVT 2/017304 grants.*

- [1] Y. Lu, L.Y. Foo, *Phytochemistry*, 2002, 59, 17.  
 [2] G. Nosál'ová, P. Capek, M. Štovská, S. Fraňová, M. Matulová, In *Floriculture, Ornamental and Plant Biotechnology*, Vol. IV, Ed. Teixeira da Silva J.A Teixeira da

Silva, J.A. Middlesex, UK, GSB, 472, 2006

- [3] P. Capek, V. Hříbalová, *Phytochemistry*, 2004, 65, 1983

### 3Po-Ut35

#### SYNTHESIS OF C-3'-BRANCHED-CHAIN ADENOSINE USING MICROWAVE ACCELERATED AZA-CLAISEN REARRANGEMENT

M. TVRDOŇOVÁ<sup>1</sup>, M. MARTINKOVÁ<sup>2</sup>, J. GONDA<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Prírodovedecká fakulta UPJŠ, Ústav chemických vied, Katedra organickej chémie*

<sup>2</sup>*University of P. J. Šafárik, Faculty of Natural Science, Institute of Chemical Science, Department of Organic Chemistry*

Korešpondenčný autor: tvrdonova@gmail.com

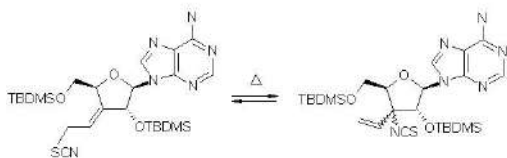
Adenosine is a highly active biologic compound with a variety of effects on numerous tissues, including heart muscle, coronary arteries, smooth muscle cells, platelets and cells involved in immune and inflammatory reactions [1]. Walton et al. first reported synthesis of modified adenosine derivatives (3'-deoxyadenosine, 3'-C-methyladenosine and their 2'-C analogs) and their biological activity [2]. Our objective is the synthesis of C-3'-branched-chain nucleoside derived from the adenosine to produce a compound which might mimic the 3'-deoxy nucleoside and the C-3' centre would no longer be recognized as the 3'-hydroxyl group of normal nucleoside. For creating a branching centre in the structure of nucleoside we decided to use [3.3]-sigmatropic aza-Claisen rearrangement of related allylic thiocyanate into the corresponding isothiocyanates. This way we also in-built a heteroatom into the branching point and we create quaternary C-3' centre with vinyl and isothiocyanato group. We study stereoselectivity of the rearrangement under conventional conditions and also under microwave irradiation. As it is known [3], microwave synthesis pretends useful method for increasing reaction times, improving yields, and producing cleaner chemistries.

*The present work was supported by Grant Agency (No. 1/2472/05 and 1/3557/06) from the Ministry of Education and Research and development support agency (APVV 20-038405) Slovak republic.*

- [1] Gessi, S., Varani, K., Merighi, S., Ongini, E., Borea, P.A., *British Journal of Pharmacology*, 129, 2-11, 2000.  
 [2] Nutt, R.F., Dickinson, M.J., Holly, F.W., Walton, E., *J.Org.Chem.*, 33, 5, 1789-1795, 1968 and references therein.  
 [3] a) Hayes, B.L., *Microwave Synthesis - Chemistry at the Speed of Light*, CEM Publishing, 2002.

b) Loupy, A., *Microwaves in Organic Synthesis*, WILEY-VCH, 2002.

c) Kappe, C.O., *Angew. Chem. Int. Ed.*, 43, 6250-6284, 2004.



Aza-Claisen rearrangement of thiocyanate derived from adenosine

### 3Po-Ut36

#### EFFECT OF COUNTERION SIZE ON PROPAGATION RATE FOR THE AQUEOUS PHASE POLYMERIZATION OF IONIZED METHACRYLIC ACID DETERMINED BY PLP-SEC TECHNIQUE

L. UČŇOVÁ<sup>1</sup>, D. CHORVÁT<sup>1</sup>, I. LACÍK<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ústav polymérov, Slovenská Akadémia Vied, Dúbravská cesta, SK-84236 Bratislava, Slovenská republika

<sup>2</sup>Polymer Institute of SAS, Dúbravská cesta 9, 84236 Bratislava

Korešpondenčný autor: lucia.ucnova@savba.sk

The knowledge on the reaction mechanisms and kinetics of free radical polymerizations is necessary to improve the experimental design, to tailor properties of resulting polymer and to model the polymerization processes accurately. All this depends on the availability of reliable rate coefficients. The advent of pulsed laser initiated techniques has enormously helped to understand the free radical polymerization [1]. For the propagation rate coefficient,  $k_p$ , the situation has improved after employing the IUPAC-recommended pulse-laser polymerization in conjunction with size-exclusion chromatography (PLP-SEC) [2]. Recently, the PLP-SEC technique has been applied for measuring the  $k_p$  for water-soluble monomers polymerized in aqueous solution. The specific interactions in aqueous phase, including hydrogen bonding, electrostatic, dipole and hydrophobic interactions, need to be considered in describing the kinetics and mechanism of polymerization in the aqueous phase. Methacrylic acid has been recognized as a model monomer for studies into  $k_p$  values in the aqueous phase in both non-ionized and ionized forms. It has been found that  $k_p$  depends on monomer concentration as well as the degree of ionization. This observation was discussed in terms of the effects on the transition state structure and polyelectrolyte effects [3]. In this contribution we deal

with methacrylic acid, especially with its ionized form. Two different neutralization agents NaOH, CsOH were used, largely differing in the size of the counterion, and polymerizations were carried between 20 and 80°C in order to obtain Arrhenius parameters for different monomer concentrations (from 5 to 40wt.%) and degrees of neutralization (from 0 to 1). The preliminary findings indicate that there is no effect of the size of counterion on the structure of transition state for propagation reaction.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. 51-037905

[1] Beuermann, S.; Buback, M. *Prog. Polym. Sci.* 2002, 27, 191-254.

[2] Olaj, O.F.; Schnöll-Bitai, I.; Hinkelmann, F. *Makromol. Chem.* 1987, 188, 1689–1702.

[3] Beuermann, S.; Buback, M.; Hesse, P.; Kukuckova, S.; Lacík, I. *Macromol. Symp.* 2007, 248, 41–49.

### 3Po-Ut37

#### OTEVŘENÉ FORMY ANTITUBERKULOTICKÝ AKTIVNÍCH BENZOAZOLŮ A JEJICH SÍRNÉ ANALOGY

Z. OKTÁBEC<sup>1</sup>, J. VINŠOVÁ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Karlova v Praze, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové

<sup>2</sup>Univerzita Karlova, Farmaceutická fakulta

Korešpondenčný autor: vinsova@faf.cuni.cz

V pripravené sérii 5,7-di-terc-butyl-benzoxazolů substituovaných v poloze 2 aromatickým substituentem vykázalo několik derivátů 100-90 % aktivitu v koncentraci 6,25  $\mu\text{g/ml}$  vůči *Mycobacterium tuberculosis* H37Rv. [1,2] Jejich otevřením, což je pravděpodobný metabolismus této skupiny látek, vznikají benzanilidy s hydroxylovou skupinou vázanou na bazickou část molekuly. U těchto substancí byla prokázána ještě vyšší antituberkulotická aktivita. Syntéza analogů je zahájena reakcí 3,5-di-terc-butyl-1,2-benzochinonu s amoniakem a následnou redukcí chinoniminu na 2-amino-3,5-di-terc-butylfenol. Poté aminofenol kondenzuje s připraveným chloridem kyseliny v prostředí chlorbenzenu. Vedlejšími produkty těchto reakcí jsou příslušné benzoxazoly, které charakteristicky světélkují pod UV 254 nm. Po sloupcové chromatografii a krystalizaci jsou připravené látky převedeny reakcí s Lawessonovým činidlem na sírné analogy. Vedlejšími produkty thionace se ukázaly být benzthiazoly, které by mohly být také potencionálně antituberkuloticky aktivní. Některé z připravených thioamidů, se podařilo převést na příslušné benzthiazoly pomocí ultrazvukové lázně. Bude změřena antimykobakteriální aktivita amidů, thioamidů a benzthiazolů a srovnána s aktivitami předlokových benzoxazolů.

Tato práce vznikla za finanční podpory MSM 0021620822, GAUK 64407/2007

- [1] Vinšová J., Horák V., Buchta B., Kaustová J.: Highly lipophilic benzoxazoles with potential antibacterial activity. *Molecules* 10, 760-770 (2005).
- [2] Vinšová J., Čermáková K., Tomečková A., Čečková M., Buchta V., Jampílek J., Čermák P., Kuneš J., Doležal M., Štaud F. Synthesis of Novel 2-Substituted 5,7-Di-tert-butylbenzoxazoles as Potential Antimicrobial Agents. *Bioorg. Med. Chem.* 2006, 14, 5850-5865.

### 3Po-Ut38

#### NEČEKANÝ VZNIK HYDROXY-N-(FENYLAMINO)-OXO-ALKYL)BENZAMIDŮ JAKO PRODUKTŮ ESTERIFIKACE AMINOKYSELIN

J. VINŠOVÁ<sup>1</sup>, M. KRÁTKÝ<sup>2</sup>, E. VAVŘÍKOVÁ<sup>3</sup>, J. MONREAL FÉRRIZ<sup>3</sup>, A. IMRAMOVSKÝ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universita Karlova, Farmaceutická fakulta

<sup>2</sup>Farmaceutická Fakulta, Univerzita Komenského

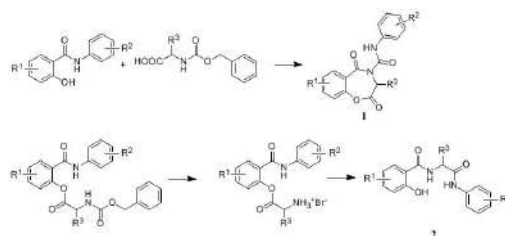
<sup>3</sup>Univerzita Karlova v Praze, Farmaceutická fakulta

Korešpondenčný autor: [vinsova@faf.cuni.cz](mailto:vinsova@faf.cuni.cz)

Při přípravě prolečiv skupiny antimykobakteriálně aktivních salicylanilidů, u nichž byla fenolická hydroxylová skupina esterifikována N-chráněnými aminokyseliny za účelem ochrany a zlepšení fyzikálně-chemických vlastností (rozpuštnost, parametr lipofility, jakožto důležitá podmínka pro přechod přes vysoce lipofilní buněčnou membránu mykobakterií) bylo zjištěno, že esterifikace salicylanilidů vede u Z-L-alaninu a Z-glycinu k cyklizaci za vzniku substitovaných benz[1,4]oxazepin-2,5-dionů 1 [1]. U dalších aminokyselin (Z-valin, Z-fenylalanin) požadovaný ester sice vznikl, ale po uvolnění aminoskupiny okamžitě přesmykl, patrně též cyklizačním mechanismem na hydroxy-N-(fenylamino)-oxo-alkyl)benzamid typu 2 [1]. Proto jsme chtěli vyzkoušet, zda se tento přesmyknutý diamid 2, který má volnou fenolickou hydroxyskupinu bude chovat analogicky. Celý sled reakcí byl proveden s Z-glycinem a Z-L-fenylalaninem. Hydroxy-N-(fenylamino)-oxo-alkyl)benzamid 2 byl podroben kondenzaci pomocí N,N'-dicyklohexylkarbodiimidu oběma N-chráněnými aminokyseliny za vzniku jejich esterifikované formy. Deprotekce N-chránící skupiny byla provedena acidolyticky (33% HBr v kyselině octové) za vzniku odpovídající hydrobromidové soli. Následně uvolnění volné aminoskupiny vedlo ke vzniku produktu, jehož struktura bude prezentována.

Tato práce je podporována MSM 0021620822 a GAUK 76807/2007.

- [1] Imramovský, A.; Vinšová, J.; Monreal Ferriz, J.; Kuneš, J.; Pour, M.; Doležal, M. Salicylanilide esterification: unexpected formation of novel 7-membered rings. *Tetrahedron Letters*, 2006, 47, 5007-5011.



### 3Po-Ut39

#### HYDROPHOBIC PROPERTIES OF SOME NOVEL ESTERS OF SALICYLANILIDES

J. JAMPÍLEK<sup>1</sup>, J. VINŠOVÁ<sup>2</sup>, A. IMRAMOVSKÝ<sup>2</sup>, J. MONREAL FÉRRIZ<sup>3</sup>, J. DOHNAL<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Zentiva a.s., U kabelovny 130, 102 37 Prague 10, Czech Republic, Department of Chemical Drugs, Faculty of Pharmacy, University of Veterinary and Pharmaceutical Sciences, Palackého 1/3, 612 42 Brno

<sup>2</sup>Universita Karlova, Farmaceutická fakulta

<sup>3</sup>Univerzita Karlova v Praze, Farmaceutická fakulta

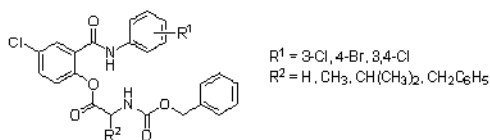
<sup>4</sup>Zentiva a.s.

Korešpondenčný autor: [vinsova@faf.cuni.cz](mailto:vinsova@faf.cuni.cz)

One of the major goals for the physicochemical screening is the prediction of absorption, e.g. the transport of a molecules through cellular membranes. The most frequent one is the passive transport through the cellular membrane, which strongly depends on the lipophilicity. Therefore hydrophobicity is the most important physical property of biologically active compounds [1]. Some substituted salicylanilide esters of acetic acid showed significant antifungal and antimycobacterial activity [2,3], therefore another twenty substituted salicylanilide esters of amino acids were synthesized and analyzed using the reversed phase high performance liquid chromatography (RP-HPLC) method for the lipophilicity measurement. The procedure was performed under isocratic conditions with methanol as an organic modifier in the mobile phase using end-capped non-polar C18 stationary RP column. In the present study the correlation between RP-HPLC retention parameter log K (the logarithm of capacity factor K) and log P values calculated in various ways are shown, as well as the relationships between the lipophilicity and the chemical structure of the studied compounds are discussed.

This study was supported by MSM 0021620822 and GAUK 285/2006/B-CH/FaF.

- [1] Avdeef A.: *Curr. Topics Med. Chem.* 1, 277 (2001).  
 [2] Jampílek J., Vinšová J., Imramovský A., Dohnal J.: *Chem. Listy* 95, 846 (2005).  
 [3] Vinšová, J., Imramovský, A., Buchta, V., Čečková, M., Štaud, F., Jampílek, J., Kaustová, J.: *Molecules* 12, 1 (2007).



### 3Po-Ut40

#### GREEN SYNTHESIS OF RESVERATROL ANALOGUES AND THEIR INTERACTION WITH DNA

M. WALKO<sup>1</sup>, V. VÍGLASKÝ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Katedra Organickej Chémie, Ústav Chemických Vied, Prírodovedecká Fakulta, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika*

<sup>2</sup>*Katedra biochémie, Ústav Chemických vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika*

Korešpondenčný autor: [mwalko@yahoo.com](mailto:mwalko@yahoo.com)

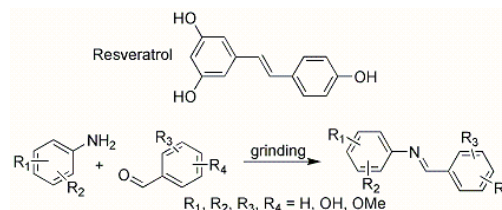
Resveratrol is a phytoalexin that displays various biological activities such as cardio- and neuroprotection, anti-inflammatory and cancer protection (1). Many of its analogues, varying usually in the positions of the hydroxyl groups, have been studied in order to develop effective treatment of various conditions. The synthesis of these analogues is quite laborious and usually only small sets of compounds have been investigated (2). Our approach is based on isosteric substitution of one of the carbons involved in the central double bond for the nitrogen. This approach allows us to create a library of compounds directly from commercially available amines and aldehydes. To make this approach even more convenient, synthetic method typical for the green chemistry was applied (3). The condensation reaction was performed solventless, by grinding the reactants in the mortar. The yields of the products were in general quantitative and resulting Schiff bases NMR pure. To explore the potential of these compounds, their interaction with DNA is studied.

*This research was supported by Slovak research and development agency (grant APVT-20-006604)*

- [1] Wolter, F.; Stein, J. *Drugs Future* 2002, 27, 949-959.  
 [2] (a) Lion, C. J.; Matthews, C. S.; Stevens, M. F. G.; Westwell, A. D. *J. Med. Chem.* 2005, 48, 1292-1295. (b) Kim, S.; Ko, H.; Park, J. E.; Jung, S.; Lee,

S. K.; Chun, Y.-J. *J. Med. Chem.* 2002, 45, 160-164.

- [3] (a) Schmeyers, J.; Toda, F.; Boy, J.; Kaupp, G. J. *Chem. Soc., Perkin Trans. 2* 1998, 989-993. (b) van den Ancker, T. R., Cave, G. W. V., Raston, C. L. *Green. Chem.* 2006, 8, 50-53.



### 3Po-Ut41

#### STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIP OF OLOMOUCINE II DERIVATIVES AS CDK INHIBITORS

M. ZATLOUKAL

*Univerzita Palackého Olomouc*

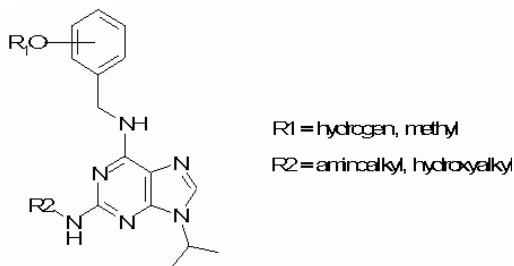
Korešpondenčný autor: [marek.zatloukal@upol.cz](mailto:marek.zatloukal@upol.cz)

Based on our previous experience with syntheses of purines, novel 2,6,9-trisubstituted purines derived from the Olomoucine II lead structure (1) were prepared and assayed for the ability to inhibit CDK1/cyclin B kinase. Most of the newly synthesised compounds display about 10 times higher inhibitory activity than Roscovitine (CYC 202), potent and specific CDK1 inhibitor. These compounds were also tested for their cytotoxicity and found to be more potent *in vitro* against tumour cells than Purvalanol A, the most active CDK inhibitor. Selected compounds may provide an effective therapy for cancer or other proliferative CDK-dependent diseases.

**Key words:** anti proliferative effect; CDK inhibitors; Cell cycle regulation; Olomoucine II; Purvalanol A; Roscovitine

GAČR

- [1] Kryštof, V.; Lenobel, R.; Havlíček, L.; Kuzma, M.; Strnad, M.; *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters* 12 (2002); 3283-3286



R1 = hydrogen, methyl; R2 = aminoalkyl, hydroxyalkyl (branched)

## Postery – sekcia 4

### 4Po-Ut1

#### VÝUKA SPEKTRÁLNÍCH METOD S VYUŽITÍM MULTIMEDIÁLNÍCH STUDIJNÍCH PODKLADŮ NA UNIVERZITĚ PALACKÉHO V OLOMOUCI

D. MILDE

Univerzita Palackého Olomouc

Korešpondenčný autor: david.milde@upol.cz

Spektrální metody patří do skupiny instrumentálních metod a jsou obvykle vyučovány v rámci kurzů analytické chemie. Na PŘF UP v Olomouci je výuka dělena do několika stupňů podle rozsahu a náročnosti a to v bakalářském i magisterském studiu.

První seznámení čeká studenty v základním kurzu analytické chemie (2. ročník bakalářského studia). Dále následuje předmět s názvem „Instrumentální metody“ s dotací 4 hodin přednášek týdně, kde asi 40 % je věnováno spektrálním metodám. Na přednášky navazuje v dalším semestru seminář a laboratorní cvičení.

Výuka v magisterském studiu se liší podle zvoleného studijního oboru. V rámci studia analytické chemie jsou pro studenty v 1. semestru povinné přednášky z „Atomové spektrometrie“, „Molekulové spektrometrie“ a „Hmotnostní spektrometrie“. V dalším semestru je řazeno laboratorní cvičení, kde jsou i úlohy ze spektrálních metod. Ve 2. ročníku si studenti vybírají z volitelných předmětů „Aplikovaná atomová spektrometrie“, „Aplikovaná molekulová spektrometrie“ a „Aplikovaná hmotnostní spektrometrie“.

V rámci grantového projektu FRVŠ byly v roce 2006 pro výuku některých z těchto předmětů připraveny multimediální podklady přístupné na webových stránkách.

Autor děkuje za podporu MŠMT ČR v rámci projektů MSM6198959216 a FRVŠ 779/2006.

### 4Po-Ut2

#### JIHOMORAVSKÝ LIGNIT - OD HISTORIE K BUDOUCNOSTI

M. PEKAŘ, M. KLUČÁKOVÁ

Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická

Korešpondenčný autor: pekar@fch.vutbr.cz

Přestože má dolování lignitu v regionu jižní Moravy tradici jdoucí alespoň 200 až 300 let do minulosti [1], je povědomí o této činnosti v uvedené lokalitě mnohem slabší a zastíněno hornickou činností v severních Čechách nebo na severní Moravě. Příspěvek se proto přehledně věnuje historii těžby lignitu v moravské části vídeňské pánve, jejímu smyslu, významu, rozsahu, kvalitě a využití těženého uhlí. Je zřejmé, že v současnosti, kdy už v oblasti funguje jen jediný důl, je již jihomoravské lignitové hornictví za vrcholem své slávy a rozmachu. Zároveň se však otevírají možnosti změny pohledu na lignit, z palivářského na chemický, možnosti využití lignitu jako chemické suroviny nebo zajímavého materiálu pro různé nepalivářské technologie. V historii byly činěny pokusy o chemické využití lignitu, které nepřekročily zdi laboratoří a byly zaměřeny víceméně „petrochemicky“ [2]. Příspěvek uvádí možné perspektivy dalšího budoucího využití jihomoravského lignitu mimo palivářský a petrochemický sektor.

[1] Škola, J., Lignit na Jižní Moravě. Nadace Landek Ostrava, 2005

[2] Daněk, J., Horník a hutník 3, 67 (1947)

### 4Po-Ut3

#### MED, POKRM (NEJEN) BOHŮ - ANEB POPULARIZACE PŘÍRODNÍCH VĚD NA DRUHÉM STUPNI ZÁKLADNÍCH ŠKOL

A. PANÁČKOVÁ<sup>1</sup>, T. ŠTOSOVÁ<sup>2</sup>, J. SOUKUPOVÁ<sup>3</sup>, A. PANÁČEK<sup>3</sup>, L. ZAJONCOVÁ<sup>2</sup>, L. KVÍTEK<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta

<sup>2</sup>Univerzita Palackého Olomouc, Přírodovědecká fakulta, Katedra biochemie

<sup>3</sup>Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta, Katedra fyzikální chemie

Korešpondenčný autor: apanackova@seznam.cz

V rámci projektu STM-Morava nazvaného Výzkum nových metod soutěží tvořivosti mládeže zaměřených na motivaci pro vědeckou výzkumnou činnost v oblasti přírodních věd, obzvláště v oborech matematických, fyzikálních a chemických jsou na vybraných základních a středních školách realizovány přírodovědné projekty, které svou náplní modelují podmínky vědecké činnosti. Hlavním cílem těchto školních projektů je motivovat žáky a studenty zajímavou a přitažlivou formou k aktivnímu zapojení se do výzkumu a vývoje v oblasti přírodních věd.

Jeden takovýto přírodovědný kroužek plný vědeckého bádání probíhal na druhém stupni ZŠ sv. Voršili v Olomouci s dětmi ze šestých až devátých tříd. Tématem, který pro žáky vybrali a zpracovali členové řešitelského týmu společně s učitelem vedoucí přírodovědný kroužek, bylo studium vlastností medu. Med se může zdát na první pohled možná nepříliš zajímavý objekt hodný vědeckému zkoumání, ale opak je pravdou a přesvědčili se o tom i samotní žáci. Med totiž mohli zkoumat z celé řady rozličných úhlů - vedle chemických a fyzikálních vlastností jej studovali například také z hlediska biologického, ale i historického či zeměpisného. Žáci se v průběhu své práce s medem naučili základům práce v chemické laboratoři (práce s kahanem, pipetami, váhami atd.), blíž se poznali některé chemické látky (sacharidy, Lugolův roztok, Fehlingovo činidlo atd.). Poprvé si žáci v praxi vyzkoušeli význam a projevy některých veličin (hustota), s dalšími se setkali vůbec poprvé (viskozita), což se jim bude možná jednou hodit při dalším poznávání přírodovědných předmětů.

Práce s medem v přírodovědném kroužku žáky velmi bavila a své výsledky průběžně zaznamenávali, aby je po skončení přírodovědného kroužku mohli prezentovat na první studentské konferenci, kterou pro ně uspořádali řešitelé projektu. Konference proběhla v Olomouci a své příspěvky přijelo prezentovat přes více než dvě stovky studentů základních a středních škol. Tak ohromná účast pro vědu zaujatých studentů a především velmi kvalitně zpracované příspěvky byly jasným důkazem naplnění vytčeného cíle projektu - přiblížit krásu a pestrost přírodních věd žákům na základních a středních školách a vzbudit v nich zájem a nadšení o tyto vědy.

*Autoři děkují za finanční podporu projektu STM-Morava, který je podporován grantem MŠMT NPV II č. 2E06029.*

#### 4Po-Ut4

### VIRTUAL EDUCATION IN RUBBER TECHNOLOGY

J. ŠULCOVÁ<sup>1</sup>, A. PLŠKO<sup>2</sup>, I. STAŇOVÁ<sup>2</sup>, P. JANYPKA<sup>3</sup>, P. BEDNÁR<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Fakulta priemyselných technológií TnUAD, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov*

<sup>2</sup>*Faculty of Industrial Technologies, University of Alexander Dubček in Trenčín, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov*

<sup>3</sup>*Matador a.s.*

Korešpondenčný autor: [sulcova@fpt.tnuni.sk](mailto:sulcova@fpt.tnuni.sk)

VERT - Virtual Education in Rubber Technology is an education project, which is financed by European Commission. The project is a part of Leonardo da Vinci programme. The duration of the project is three years (2004-2007). The aim of the project is to develop a professional development learning program for rubber industries. The developed learning modules offer appropriate contents for the individual needs of students with different background experience and studies. The target sector is the rubber industry and its partner industries like automotive manufacturing, machine building and offshore industry. The target groups include rubber industry employees as well as university students in Europe. The basic course modules contain general topics of rubber technology including rubber chemistry and physics, raw materials, processing and characterization. Special courses handle e.g. the reinforcing of rubber products and vehicle dynamics as far as rubber components are concerned. All studying materials are in digital form. Virtual courses enable good opportunities for interactive international studies in rubber technology. Virtual learning system is flexible and location independent. That's why it suits well to studying beside work. Virtual learning systems make interactive group studies possible so that employees from different countries can share their expertise. The project also increases transparency between different organisations and administrations in European rubber industry. As a result of the co-operation between rubber technology experts from the universities and industry a high quality professional training program can be created.

More information: [www.tut.fi/plastics/vert](http://www.tut.fi/plastics/vert)

#### 4Po-Ut5

### IUPAC COMPENDIUM OF CHEMICAL TECHNOLOGY -

J. JIRÁT<sup>1</sup>, M. NIČ<sup>2</sup>, B. KOŠATA<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*VŠCHT Praha*

<sup>2</sup>*Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28, Praha 6*

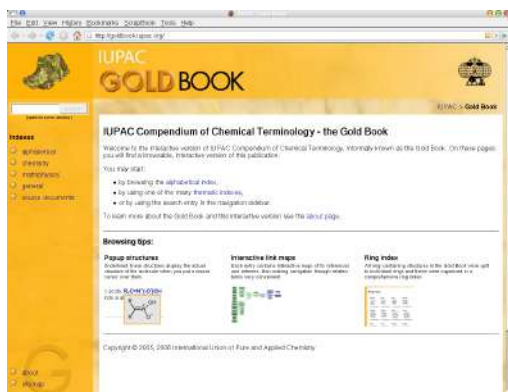
Korešpondenčný autor: [Jiri.Jirat@vscht.cz](mailto:Jiri.Jirat@vscht.cz)

IUPAC Compendium of Chemical Technology (IUPAC



kompendium chemické technológie), známé jako "Gold Book" je jedním ze základních příspěvků organizace IUPAC k lepší a srozumitelnější komunikaci chemiků. Toto dílo obsahuje přes 6 500 termínů a definicí z jiných kompendií a primárních zdrojů (jiné "barevné" knihy, např. "Green Book: IUPAC Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry" nebo "Orange Book: IUPAC Compendium of Analytical Nomenclature"; články v časopisu Pure and Applied Chemistry aj.). Obě vydání kompendia jsou rozebrána, k dispozici zůstala jednotlivá hesla ve formátu PDF na stránkách organizace IUPAC. Použitelnost takového souboru dokumentů je však silně limitovaná - jediný rejstřík je abecední, prohledávací schopnosti hesel špatná. Členové IUPACu si toto dobře uvědomili a pod projektem "Standard XML Data Dictionaries for Chemistry" (2002-022-1-024) byl započat převod kompendia do XML verze. Na tomto projektu spolupracovali pod vedením Steva Steina členové Laboratoře informatiky a chemie VŠCHT Praha a Vydavatelství VŠCHT Praha. Výsledkem pětiletého úsilí je jedinečný zdroj informací [1], využívající plně moderní počítačové technologie a nabízející neobvyklý komfort pro uživatele - množství specializovaných rejstříků (rejstřík sumárních vzorců, acyklických sloučenin, ring index, strukturální rejstřík, rejstřík fyzikálních konstant, jednotek a veličin), full-textové vyhledávání, "mapy odkazů" spojující relevantní termíny.

[1] <http://goldbook.iupac.org/>



Kompendium "Gold book" - vstupní strana

#### 4Po-Ut6

### ELEKTRONICKÁ ENCYKLOPEDIA BIOCHEMIE

J. ZNAMENÁČEK<sup>1</sup>, J. JIRÁT<sup>1</sup>, M. NIČ<sup>2</sup>, E. DIBUSZOVÁ<sup>1</sup>, B. KOŠATA<sup>2</sup>, M. KODÍČEK<sup>3</sup>, M. STROHALM<sup>3</sup>

<sup>1</sup>VŠCHT Praha

<sup>2</sup>Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28, Praha 6

<sup>3</sup>VŠCHT Praha, Ústav biochemie a mikrobiologie

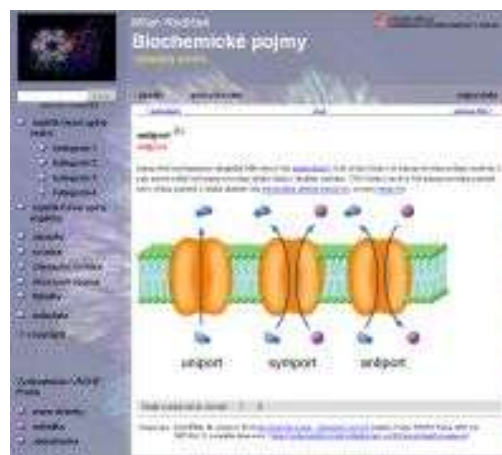
Korešpondenční autor: [Jiri.Znamenacek@vscht.cz](mailto:Jiri.Znamenacek@vscht.cz)

Současná produkce vydavatelství VŠCHT Praha se odehrává souběžně ve dvou úrovních - standardní tištěné publikace a jejich elektronické verze. Tyto elektronické materiály jsou přitom zdarma dostupné na webových stránkách vydavatelství [1]. Většina publikací je do elektronické podoby převedena stránku po stránce, ale některé - zvláště slovníkového charakteru - jsou zpracovány způsobem více vyhovujícím jejich uspořádání.

Příkladem druhého typu publikací je kniha „KODÍČEK, M. *Biochemické pojmy - výkladový slovník*. 1<sup>st</sup> ed. Praha : VŠCHT Praha, 2004“ [2], která je v současné době připravována k druhému, podstatně rozšířenému vydání. Tím se stala první publikací, která je připravována nikoli z autorského rukopisu, ale z elektronické XML-verze získané z vydání prvního, čímž nám umožnila vyzkoušet zcela nový přístup jak k psaní publikací, tak jejich přípravě k vydání elektronickému i tištěnému. Zároveň díky novým interaktivním prvkům jasně ukazuje, v čem mohou elektronické publikace doplnit (a pro někoho možná i zcela nahradit) standardní tištěné.

[1] [http://vydavatelstvi.vscht.cz/katalogy-e/katalog\\_e-books\\_cze.html](http://vydavatelstvi.vscht.cz/katalogy-e/katalog_e-books_cze.html)

[2] [http://vydavatelstvi.vscht.cz/knihy/uid\\_es-002/](http://vydavatelstvi.vscht.cz/knihy/uid_es-002/)



Elektronická encyklopedie biochemie

#### 4Po-Ut7

### EVROPSKÁ SPOLUPRÁCE VE VZDĚLÁVÁNÍ - PROGRAM SOCRATES/ERASMUS

J. SVATOŠOVÁ

VŠCHT Praha

Korešpondenční autor: [jitka.svatosova@vscht.cz](mailto:jitka.svatosova@vscht.cz)



České i slovenské vysoké školy se zapojily do evropských vzdělávacích programů od akademického roku 1998/1999. Od té doby využilo dle statistik možnost studovat v zahraničí několik tisíc studentů a stovky učitelů. Vysoké školy studenty nejen vysílají na zahraniční studijní pobyty, ale také přijímají studenty partnerských univerzit. Tato skutečnost ovlivňuje výuku na vysokých školách a mění i prostředí. Má pozitivní vliv na úroveň absolventů.

Pro období 2007-2013 je připravena nová fáze vzdělávacích programů s názvem Program celoživotního učení.

## Postery – sekcia 5

### 5Po-Ut1

#### DETECTION OF GENOTOXICITY OF CHEMICAL COMPOUNDS USING DIRECT CLEAVAGE OF SUGAR-PHOSPHATE BACKBONE IN SUPERCOILED PLASMID DNA

Z. PAVLÍČKOVÁ<sup>1</sup>, J. ČERVENÝ<sup>2</sup>, K. MALACHOVÁ<sup>1</sup>, P. PEČINKA<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Katedra biologie a ekologie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita v Ostravě, 30 dubna 22, 701 03, Ostrava

<sup>2</sup>Přírodovědecká fakulta Ostravské univerzity v Ostravě

Korešpondenční autor: zuzana.pavlickova@osu.cz

Compounds interacting with nucleic acids can be divided into two major groups.

Chemicals belonging into the first group cleave sugar-phosphate backbone, interactions of the second group with DNA lead to modification of bases.

We focused on the oxidizing agents in our study:  $\text{KMnO}_4$ ,  $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ ,  $\text{K}_2\text{CrO}_4$ ,  $\text{KClO}_3$ ,  $\text{KClO}_4$ ,  $\text{K}_2\text{S}_2\text{O}_8$ , peroxiacetic acid and  $\text{NaClO}$ . These chemicals are suspected to be able to damage DNA at sugar-phosphate backbone level.

The detection of the sugar-phosphate backbone cleavage was done by means of the agarose gel electrophoresis. The introduction of nicks into circular plasmid molecule results in changes in DNA topology - DNA molecule undergoes from supercoiled (sc) to open circular (oc) form. Changes in conformation can be easily detected using gel electrophoresis because of lower electrophoretic mobility of ocDNA form in comparison with that of scDNA due to its lower compactness.

$\text{KMnO}_4$ ,  $\text{K}_2\text{S}_2\text{O}_8$  and peroxiacetic acid were found to interrupt phosphodiester bonds in sugar-phosphate backbone among tested compounds. Based on our results, this detection method can be used for further study of chemical compounds interactions with DNA. It seems to be also very perspective for testing of compounds with antimutagenic effects.

### 5Po-Ut2

#### POLLUTANT LOAD FROM THE ANTHROPOGENIC ACTIVITIES IN BANSKÁ BYSTRICA REGION

D. SAMEŠOVÁ<sup>1</sup>, I. NAGYOVÁ<sup>2</sup>, Z. MELICHOVÁ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Technická univerzita, Fakulta ekológie a environmentalistiky, Katedra environmentálneho inžinierstva

<sup>2</sup>Univerzita Mateja Bela, Katedra chémie, Fakulta prírodných vied, Banská Bystrica

Korešpondenčný autor: samesova@vsld.tuzvo.sk

The aim of this paper is the evaluation of anthropogenic loading of upper Hron's catchment area, that is the valley surrounded with mountains. It is the narrow stripe with stream, with varied radial and longitudinal structure and with hard conditions for spreading the pollutants. The climate situation of Hron's catchment area belongs to European continental region of temperate zone with ocean air masses, which are changed by continental way. Contemporary landscape structure is a result of long-time human impact on the landscape. The human impact intensity influenced both the proportion of stability and quality of landscape system. In the paper is evaluated the pollutants amount [1, 2] drained from main contamination sources into air and Hron river. Pollutants are evaluated especially from the point of view of their hazardous chemical properties [3] that are the leading factor in the disturbing process of natural balance of water ecosystem. Beside the mentioned facts, the great negative influence, on chemical substances balance at this locality, has dealing with waste too. There is a review of waste production which is influenced mainly by metallurgical (Železiarne, a.s., Podbrezová), petrochemical (Petrochema, a.s. Dubová), pharmaceutical industry (Biotika, a.s., Slovenská Ľupča) as well as undeveloped municipal waste management.

*This work was supported by grants agencies VUGA 8/2006 Matej Bel University and VEGA 1/2418/05 Ministry of Education of Slovak Republic.*

- [1] Tölgyessy, J., Melichová, Z.: *Chémia vody (Voda a jej ochrana)*. Banská Bystrica: FPV UMB, 2000. 154 s. ISBN 80-8055-293-2.
- [2] Ladomerský, J., Samešová, D.: *Environmentálne impakty a analýzy ropných látok*. Zvolen: FEE TU, 2000. 82 s. ISBN 80-228-1081-9.
- [3] Zákon č.163/2001 Z. z. o chemických látkach a chemických prípravkoch v znení neskorších predpisov.

**5Po-Ut3****APPLICATION OF AFFINITY CHROMATOGRAPHY FOR BACTERIAL PEPTIDASE PURIFICATION**E. SZABOVÁ<sup>1</sup>, D. URMINSKÁ<sup>2</sup><sup>1</sup>*Faculty of Biotechnology and Food Sciences Slovak Agricultural University in Nitra*<sup>2</sup>*Slovenská poľnohospodárska univerzita v Nitre*Korešpondenčný autor: *eva.szabova@uniag.sk*

Affinity chromatography is based on selective non-covalent interaction between enzyme and specific molecules, e.g. competitive inhibitor. This interaction is very specific and enable to achieved the pure enzyme preparation.

By submerge cultivation of *Bacillus licheniformis* L-3 was prepared alkaline bacterial peptidase. Enzyme preparation was isolated with acetone precipitation and gel filtration chromatography on Sephadex G-25 and G-100. It was reached the degree of purification about 13,6-times. For protein concentration and peptidase activity determination were used Bradford, resp. Ash methods. Chromatography fractions with enzymatic activity were collected and inspissated by vacuum evaporator. For next purification was used ion exchange chromatography on DEAE-cellulose. On this system was obtained the degree of purification 18,7-times. The last steps of enzyme purification were applications of affinity chromatography on *p*-aminobenzamidine-Sepharose a bacitracin-Sepharose. On the first carrier was achieved the degree of purification about 58-times and on the second one it was about 63-times. Relative molecular weight of bacterial enzyme preparation determined by SDS-PAGE was about 29 kDa.

*This work was supported by programme of research and development No. 2003SP270280E010280E01.*

**5Po-Ut4****VYUŽITIE ZVÝŠKU PO IZOLÁCII L-ARABINÓZY Z REPNÝCH REZKOV PRI VÝROBE PAPIERA**M. FIŠEROVÁ<sup>1</sup>, J. GIGAC<sup>1</sup>, M. ROSENBERG<sup>2</sup>, H. HRONSKA<sup>2</sup><sup>1</sup>*Výskumný ústav papiera a celulózy a.s., Lamačská cesta 3, 841 04 Bratislava*<sup>2</sup>*Slovenská technická univerzita, Fakulta Chemickej a Potravinárskej technológie, Radlinského 9, Bratislava, 812 37*Korešpondenčný autor: *fiserova@vupc.sk*

Prešetrila sa možnosť využitia vláknitého zvyšku repných rezkov po enzýmovej hydrolýze a izolácii L-arabinózy, pri výrobe papiera. V laboratórnych podmienkach sa porovnal vplyv zanášky pôvodných a enzymaticky modifikovaných repných rezkov, mletých vo

Valley holandri na rovnaký stupeň, na vlastnosti suspenzie a papiera zo sóda-AQ polobuničiny a recyklovaných vlákien. Enzymaticky modifikované repné rezky spotrebovali menej energie pri mletí ako pôvodné repné rezky. So zvyšovaním zanášky repných rezkov v zmesi s drevnými vláknami sa zvyšoval stupeň mletia, doba odvodnenia a retencia vody vo vláknach, významnejšie s prídavkom enzymaticky modifikovaných repných rezkov. Priemerná vážená dĺžka vlákien zmesi sa so zvyšovaním zanášky repných rezkov znižovala. Pevnosť pri pretrhnutí, absorpcia ťahovej energie, pevnosť v prietlaku, vnútorná väzbová pevnosť a odolnosť proti plošnému zošúvereniu papiera sa zvyšovali so zanáškou repných rezkov, významnejšie s prídavkom enzymaticky modifikovaných repných rezkov. S prídavkom repných rezkov k drevným vláknam sa najvýznamnejšie zvýšila vnútorná väzbová pevnosť, čo potvrdzuje ich účasť na vytváraní väzbového systému v papieri. Odolnosť proti ohnutiu a porozita papiera sa znižovali so zanáškou repných rezkov, viac s prídavkom enzymaticky modifikovaných. Stupeň hydrolýzy repných rezkov len v malej miere ovplyvnil vlastnosti suspenzie a papiera.

Využitie vláknitého zvyšku po izolácii L-arabinózy z repných rezkov je výhodné z ekologického a ekonomického hľadiska. Možno ním nahradiť časť drevných vlákien a papierenské prostriedky pre zvýšenie pevnosti papiera za sucha. Zanáška repných rezkov v zmesi s drevnými vláknami by nemala prekročiť 10 až 15% pri výrobe papierov na výrobu obalov. Pri vyššej zanáške repných rezkov by sa zhoršila prevádzkovateľnosť papierenského stroja.

*Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APVV-99-007405*

**5Po-Ut5****BUCKWHEAT (FAGOPYRUM ESCULENTUM MOENCH.) - A SOURCE OF BIOLOGICALLY ACTIVE COMPONENTS IN BREAD**T. BOJŇANSKÁ<sup>1</sup>, D. URMINSKÁ<sup>2</sup><sup>1</sup>*Fakulta biotechnológie a potravinárstva, Slovenská poľnohospodárska univerzita v Nitre*<sup>2</sup>*Slovenská poľnohospodárska univerzita v Nitre*Korešpondenčný autor: *Tatiana.Bojnanska@uniag.sk*

Common buckwheat is a typical low input crop rich in minerals and with high nutritional quality of proteins. Content of fibre, starch with reduced speed of digestion and rutin made buckwheat products favorable for healthy nutrition, for patients with diabetes and celiac disease (Guo and Yao 2006, Kreft et al. 1997). The present study focuses on the possibilities of preparation of enriched bread as a source of biologically active components in nutrition. Buckwheat wholegrain flour was blended with wheat flour in different portions (10, 20, 30, 40 and 50



Korešpondenčný autor: *zlatica.kohajdova@stuba.sk*

Compounds isolated from plant materials (e.g. garlic, onion) are well known with antimicrobial and healthy beneficial properties (1). But only several articles were published about application of these compounds in baked goods (2, 3).

In this paper the effect of garlic juice (0,5 %, 1 %, 2 % and 3 %) on rheological properties of wheat-spelt dough and baked goods was studied using farinograph and the baking test. Dough was prepared from blend flour containing fine wheat flour and wholemeal spelt flour in ratio 85:15.

Farinograph readings gives a clear decreasing of water absorption for all the doughs compared to the control ones (from 59 % to 56,5 %) Addition of garlic juice showed and deterioration effect on dough stability. Addition of garlic juices concluded in noticeable increasing of mechanical tolerance index (from 120 to 195 B.J.). Garlic juice addition resulted in lower loaf volume and specific volume. The volume reducing effect of garlic was hypothesized to be a result of interchange reactions between thiol compounds in the garlic and disulfide bounds in the dough (2). Baked goods flavouring with garlic juice at low levels (0,5 and 1 %) were considered by panelist to have more pleasant flavours than the control samples. Baked goods with 3 % addition of garlic juice were darker in crust colour comparing with control one. This might be due to the higher content of soluble sugars, such as sucrose, glucose, fructose and raffinose in garlic, which readily enters into non-enzymatic browning reactions during baking process.

#### Acknowledgement

*This work was supported by the Slovak Grant Agency for Science VEGA (Grant No. 1/3546/06), APVT (Grant No. 20-002904), AV (Grant No. 4/0013/07) and APVV (Grant No. 031006).*

- [1] Harris, J. R., Cotterell, S. L., Plummer, S., Lloyd, D.: Antimicrobial properties of *Allium sativum* (garlic). *Applied Microbiology and Biotechnology*, 57, 2001, p. 282-286.
- [2] Faheid, S. M. M.: Studies on onion and garlic bread. *Deutsche Lebensmittel Rundschau*, 95, 1999, No. 1, p. 17-22.
- [3] Miller, R. A., Hosoney, R. C., Graf, E., Soper, J.: Garlic effects on dough properties. *Journal of Food Science*, 62, 1997, No. 6, p. 1198-1201.

#### 5Po-Ut8

### INFLUENCE OF POTASSIUM IODATE ON QUALITY OF WHEAT-SPELT BAKED GOODS

Z. KOHAJDOVÁ<sup>1</sup>, J. KAROVIČOVÁ<sup>2</sup>, J. LEHKOŽIVOVÁ<sup>2</sup>, Ž. GAJDOŠOVÁ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Biochemical and Food Technology, Department of Food Technology, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK - 812 37 Bratislava, Slovakia.*

<sup>2</sup>*Slovenská technická univerzita, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav biotechnológie a potravinárstva, Oddelenie potravinárskej technológie*

Korešpondenčný autor: *zlatica.kohajdova@stuba.sk*

Iodine deficiency disorder is a significant world-wide public health problem, especially in developing countries (1). Several ways are recommended how to avoid iodine deficiency in food of many countries' population. In addition to the common use of salt fortified with KI, KIO<sub>3</sub> can also be used in bakery products. It is also a strong oxidizer improving rheological properties of dough (2).

In this paper the effect of KIO<sub>3</sub> on rheological properties of wheat-spelt dough and baked goods was studied using farinograph and the baking test.

Water absorption capacity was not markedly affect with increasing dose of KIO<sub>3</sub>. The dough development time decreased with increasing dose of KIO<sub>3</sub>. Dose of 1 a 2 mg of KIO<sub>3</sub> reduced dough development time about 50 %. The dough stability was clearly affected KIO<sub>3</sub>, obtaining a increase of the stability at the highest KIO<sub>3</sub> concentration tested.

Results of baking test were expressed as the loaf volume, loaf specific volume The best results of volume increase in laboratory baking tests were obtained with the addition of 1 and 2 mg of KIO<sub>3</sub> (increase approx. 21 or 25 % in comparison to baked goods without KIO<sub>3</sub>). The baked goods with 2 mg dose of KIO<sub>3</sub> were the most acceptable from the sensory point of view. Results of baking tests showed that doses higher than 3 mg did not further baking test results.

#### Acknowledgement

*This work was supported by the Slovak Grant Agency for Science VEGA (Grant No. 1/3546/06), APVT (Grant No. 20-002904), AV (Grant No. 4/0013/07) and APVV (Grant No. 031006).*

- [1] Chavasit, V. - Malaivongse, P. - Judprasong, K.: Study on stability of iodine in iodated salt by use of different cooking model conditions. *Journal of food composition and analysis*, 15, 2002, No. 3, p. 265-276.
- [2] Špačková, Z. - Příhoda, J. - Rovnaníková, S.: Simultaneous enrichment of wheat flour with iodine and improvement of rheological properties of wheat dough. *Czech Journal of Food Sciences*, 19, 2001, No. 6, p. 219-223.

## 5Po-Ut9

**BIOMODIFIKOVANÉ ZEOSORBENTY NA BÁZE  
PRÍRODNÉHO KLINOPTILOLITU**

L. FORTUNOVÁ<sup>1</sup>, M. REHÁKOVÁ<sup>1</sup>, S. ČUVANOVÁ<sup>2</sup>,  
L. GABEROVÁ<sup>3</sup>, M. KUŠNIEROVÁ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Univerzita P. J. Šafárika, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických  
vied, Košice

<sup>2</sup>Ústav geotechniky SAV v Košiciach

<sup>3</sup>Laboratoire Madirel, UMR CNRS Université de Provence, Centre de  
Saint-Jérôme, Marseille, France

Korešpondenčný autor: [lubica.fortunova@upjs.sk](mailto:lubica.fortunova@upjs.sk)

Znečistenie životného prostredia v súčasnom období nadobúda čoraz väčšie rozmery neustále sa zvyšujúcou priemyselnou výrobou a intenzívnym poľnohospodárstvom. V popredí záujmu výskumu je vývoj menej znečisťujúcich postupov a technológií vedúcich k eliminácii týchto nepriaznivých vplyvov. Prírodné zeolity poskytujú vysoký potenciál využitia aj v rámci remediálnych procesov.

V snahe dosiahnuť väčší sorpčný povrch prírodného zeolitu typu klinoptilolitu [1], a tým získať efektívnejšie výsledky jeho využívania pri znižovaní obsahu reziduí ťažkých kovov (Cu, Pb, Cd, Zn a Cr) a iných toxických látok (napr. PCB) v priemyselne kontaminovaných pôdach, sa pokračovalo v štúdiu biomodifikovaných zeosorbentov využitím mikroorganizmov *Acidithiobacillus ferrooxidans*.

Študoval sa samotný prírodný klinoptilolit a modelové formy zeolitov s obsahom med'natých iónov z hľadiska zväčšenia sorpčného povrchu, biolúhovania med'natých iónov i ďalších zmien spôsobených metabolickou činnosťou mikroorganizmov. Hlavnou motiváciou výskumu bolo zefektívnenie remediácie pôd kontaminovaných vysokými koncentraciami ťažkých kovov a iných toxických látok.

Výsledky analýz veľkosti povrchu a objemov pórov prírodného klinoptilolitu pred kontamináciou a po kontaminácii mikroorganizmami potvrdili, že metabolickou činnosťou mikroorganizmov, ale i samotného živného média došlo k zväčšeniu sorpčného povrchu. Zo súboru pôdných mikroorganizmov bol vybraný mikroorganizmus *Acidithiobacillus ferrooxidans* jednak z dôvodu jeho dostupnosti a jednak z dôvodu predchádzajúcich experimentálnych skúseností ich využitia pri extrakcii ťažkých kovov z aluminosilikátovej štruktúry [2]. *Acidithiobacillus ferrooxidans* sa využíva v minerálnych biotechnológiách na extrakciu Cu, Fe a iných kovov a je prítomný v pôde v malých koncentráciách.

Kombinácia využitia prírodných zeosorbentov a metabolickej činnosti mikroorganizmov sa javí ako perspektívna ekologická alternácia degradácie kontaminantov.

Táto práca vznikla s finančnou podporou projektu APVV 51-027705 a VEGA 2/7163/27

[1] Reháková, M., Čuvanová, S., Dzivák, M., Rimár, J. and Gaval'ová Z.: Current Opinion in Solid State & Material Science. 8, 397 (2004).

[2] Kušnierová, M., Fečko, P. Minerálne biotechnológie I. - v ťažbe a úprave rúd sulfidických ložísk. VŠB-TU, Ostrava 2001, p.143.

## 5Po-Ut10

**ISOFLAVONOIDS IN THE CANNABACEAE  
FAMILY**

R. KOBLOVSKÁ

Vysoká škola chemicko-technologická Praha

Korešpondenčný autor: [koblovsr@vscht.cz](mailto:koblovsr@vscht.cz)

Isoflavones (3-phenylchromones) attract long-lasting human and veterinary medicine interest due to their numerous biological activities. In contrast to flavones (2-phenylchromones), which are widely spread in all vascular plants, isoflavonoids have been marked in limited numbers of plant families. This phenomenon is usually described as an absence of isoflavone synthase (IFS) gene. Recently this enzyme was sequenced in some members of the *Fabaceae* and the *Chenopodiaceae* families and the gene was classified as a member of the subfamily of cytochrome P450 CYP93B2.

Our group deals with screening of plant families, which have not been analyzed for content of isoflavonoids yet. The analytical procedure is based on the combination of HPLC-MS and immunochemical methods.

Among others we have also analyzed the Cannabaceae family. Both analytical methods showed presence of range of 5-hydroxyisoflavons and 5-deoxyisoflavons. The content of individual compounds ranged from tenths up to units of milligrams per kilogram (dry weight). Cannabaceae is a sparse plant family, it comprises of two genera (*Humulus* and *Cannabis*) altogether with six species. However, both genera are very unique and important for pharmaceutical and food industry.

In order to put our findings into a gene context, we focused on the identification of gene/genes encoding the IFS in the Cannabaceae family. With the help of molecular biology methods, we identified a sequence highly homologous to IFS described in several species belonging to the *Fabaceae* family. Now we are working on acquiring the whole sequence of the gene.

*Acknowledgment* : This study was supported by Grants 525/06/0864 from the Grant Agency of the Czech Republic and 6046137305 from Ministry of Education, Youth and Sports.

**5Po-Ut11****STUDIUM FOTOKATALYTICKE REDUKCE  
RTUŤNATÝCH IONTŮ S VYUŽITÍM  
HETEROGENNÍ KATALÝZY**P. MOŽÍŠKOVÁ<sup>1</sup>, M. VESELÝ<sup>2</sup><sup>1</sup> Vysoké učení technické v Brně<sup>2</sup> VUT v Brně, Fakulta chemická, Ústav fyzikální a spotřební chemie

Korešpondenčný autor: moziskova@fch.vutbr.cz

V súčasnej dobe má rastoucí produkce zejména v oblasti průmyslu za následek tvorbu velkého množství, ve většině případů, nebezpečných odpadů. Známé metody odstraňování toxických těžkých kovů z odpadních průmyslových vod, mezi které patří chemické srážení, iontová výměna, adsorpce či elektrolýza, mají svá omezení a to zejména v pomalé kinetice procesu, nízké adsorpční kapacitě, nízké výťažnosti nebo ve velmi vysokých finančních nákladech. A proto se začaly zkoumat nové možnosti a technologie odbourávání těchto polutantů. S využitím heterogenní katalýzy byla zkoumána fotokatalytická redukce rtuťnatých iontů v ponorném průtočném systému. Během pozorování byla vodná suspenze oxidu titaničitého (fotokatalyzátor) ozářována ultrafialovým zářením. Vlivem UV záření nastala fotoexcitace v nanočásticích TiO<sub>2</sub>. Elektrony z valenční hladiny polovodiče, byly přímo vyexcitovány do vodivostní, odkud se mohly přímo účastnit redukce s nasorbovaným Hg(II) iontem na povrchu TiO<sub>2</sub>. Výsledným redukčním produktem byla Hg(0) sorbovaná na částicích oxidu titaničitého. Vyexcitované elektrony způsobily vznik kladného náboje ve valenční hladině. Aby nedocházelo ke zpětné rekombinaci vzniklých elektronů a děr, musí být v systému přítomna další látka zvaná donor elektronů. Nejčastěji se jedná o organické i anorganické látky, které jsou schopny se lehce oxidovat vzniklými dírami, přičemž výsledným produktem jejich rozkladu je H<sub>2</sub>O a CO<sub>2</sub>. Množství vyredukované Hg(0) závisí především na pH, koncentraci a druhu donoru elektronů, množství vlastního katalyzátoru a intenzitě světelného zdroje. Rychlost redukce Hg(II) byla kontrolována, po centrifugaci oxidu titaničitého, spektrofotometricky pomocí barevné změny vyvolané reakcí Hg(II) s Br-PADAP (čínidlo) v kyselém prostředí. Rychlost reakce byla vyjádřena pomocí formální rychlostní konstanty 1. řádu.

- [1] Marta I. Litter: Heterogeneous photocatalysis transitional metals ions in photocatalytic systems, *Applied Catalysis B: Environmental*, vol. 23, p. 89-114, 1999.
- [2] Dingwang Chen, Ajay K. Ray: Removal of toxic metal ions from waste water by semiconductor photocatalysis, *Chemical Engineering Science*, vol. 56, p. 1561-1570, 2001.
- [3] Xiaoling Wang, S. O. Pehkonen, Ajay K. Ray: Photocatalytic reduction of Hg(II) on two commercial

TiO<sub>2</sub> catalysts, *Electrochimica Acta*, vol. 49, p. 1435-1444, 2004.**5Po-Ut12****FUROZÍN V KEČUPOCH**J. LEHKOŽIVOVÁ<sup>1</sup>, J. KAROVIČOVÁ<sup>1</sup>, M. VOLDŘICH<sup>2</sup><sup>1</sup> Slovenská technická univerzita, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav biotechnológie a potravinárstva, Oddelenie potravinárskej technológie<sup>2</sup> Vysoká škola chemicko-technologická v Prahe, Fakulta potravinářské a biochemické technologie, Ústav konzervace potravin a technologie masa

Korešpondenčný autor: jarmila.lehkozivova@stuba.sk

Furozín ( $\epsilon$ -N-2-furoylmetyl-L-lyzín), vznikajúci v začiatkových štádiách Maillardovej reakcie, je aminokyselina tvorená počas kyslej hydrolýzy Amadoriho zlúčenín reakciou  $\epsilon$ -aminoskupín lyzínu s glukózou, laktózou a maltózou. Furozín je teda považovaný za vhodný indikátor stupňa tepelného poškodenia v mlieku, cestovinách, mäsových výrobkoch, džemoch, ale tiež v rajčiakových produktoch. Umožňuje hodnotenie kvality produktu a výrobných technológií, pretože jeho koncentrácia vzrastá vplyvom nadmerného zahrievania alebo nevhodného skladovania [1, 2]. Kečup je výrobok, ktorý sa spravidla vyrába z rajčiakového pretlaku po zriedení na 15% rozpustnej sušiny. Ochucuje sa cukrom, soľou, octom, korením, výtlačkom z koreninovej papriky, alebo ďalšími ochucovadlami.

Cieľom práce bolo kvalitatívne stanovenie furozínu vo vzorkách kečupov. Stanovenie sa uskutočnilo metódou HPLC na kvapalinovom chromatografe Knauer Smartline Manager 5000 s UV-VIS detektorom Safir s použitím kolóny Phenomenex<sup>®</sup> Luna C18(2) 5 $\mu$  100A (250  $\times$  4,60 mm). Predúprava vzorky spočívala v hydrolýze s 8 cm<sup>3</sup> 8 M HCl pre teplotu 110 °C 23-24 h. Potom sa 1 cm<sup>3</sup> vzorky odstredí 10 min pri 1400 g. 0,5 cm<sup>3</sup> supernatantu sa eluovalo cez náplň Sep-Pak C<sub>18</sub>, ktorá sa najprv premyla 5 cm<sup>3</sup> metanolu a 10 cm<sup>3</sup> deionizovanej vody. Furozín sa eluoval s 3 cm<sup>3</sup> 3 M HCl a 20  $\mu$ l sa nastreklo do HPLC. Analýza bola vykonaná izokraticky pri laboratórnej teplote s mobilnou fázou: 5 mM 1-heptánsulfonát sodný + 20% acetonitril + 0,2% HCOOH a prietokom 0,5 cm<sup>3</sup>.min<sup>-1</sup>. UV detektor bol nastavený na vlnovú dĺžku 280 nm [3]. Furozín sa nachádzal v 67% vzoriek kečupov.

Meranie bolo uskutočnené na Ústave konzervace potravin a technologie masa FPBT VŠCHT v Prahe.

Podakovanie: Táto práca bola podporovaná grantom APVT č. 20-002904 a grantom VEGA č. 1/3546/06.

- [1] Hidalgo, A., Pompei, C.: *J. Agric. Food Chem.*, 48, 78-82 (2000).

[2] Rufian-Henares, J. A., Guerra-Hernández, E., García-Villanova, B.: *Food Res. Int.*, 35, 527-533 (2002).

[3] Delgado-Andrade, C., Rufián-Henares, J. A., Morales, F. J.: *Food Chem.*, 100, 725-731 (2007).

### 5Po-Ut13

#### PŘÍPRAVA VZORKŮ PRO ROHS ANALÝZU

J. PALARČÍK<sup>1</sup>, M. POUZAR<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická

<sup>2</sup>Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Ústav ochrany životního prostředí, nám. Čs. legií 565, 53210 Pardubice, Česká republika

Korešpondenční autor: *jiri.palarcik@upce.cz*

Zkratkou RoHS se označuje směrnice Evropského parlamentu a Rady Evropy 2002/95/EC s názvem "The Restriction of the Use of Certain Hazardous Substances in Electrical and Electronic Equipment". Ta zakazuje po 1. červnu 2006 uvádět na trh EU nová elektrická a elektronická zařízení, ve kterých je pro vyjmenované prvky a látky překročena jejich předepsaná limitní hodnota. Jedná se o těžké kovy Cd, Pb, Hg, CrVI a dále o retardanty hoření polybromované bifenyly (PBB) a polybromované difenyletery (PBDE). Pro chemickou analýzu těchto materiálů a stanovení jednotlivých prvků a látek existuje spousta technik a metod (XRF, AAS, UV-VIS fotometrie, plynová chromatografie s hmotnostní spektrometrií). Každá je však spojená s řadou problémů, které znesnadňují jejich použití (citlivost metody, finanční náročnost, aplikovatelnost a různé typy materiálů, nároky na přípravu vzorku). Tato práce je zaměřena právě na přípravu elektrických a elektronických součástek pro možnosti další analýzy. Jelikož je nutné, aby se jednalo o homogenní materiál, byly jednotlivé vzorky nejprve mlety v kryogenním mlýnu a následně byla provedena separace kovových a umělohmotných částic, které byly následně analyzovány. Vzhledem k povaze zpracovávaného materiálu a s ohledem na požadavky dalších analýz bylo našim cílem najít vhodnou metodu a podmínky, za kterých separaci provést. Z dostupných způsobů rozdělování materiálů jsme použili flotaci a dále třídění částic pomocí proudu vzduchu. Jako nejvhodnější způsob se ukázalo právě vzduchové třídění, ke kterému jsme použili aparaturu pracující na principu tzv. Gonellova třídiče.

Tato práce vznikla za podpory výzkumného záměru č. MSM 0021627502

### 5Po-Ut14

#### VLIV $\beta$ -HCH NA ROSTLINY KUKUŘICE A OBSAH THIOLOVÝCH SLOUČENIN

O. KRYŠTOFOVÁ<sup>1</sup>, J. KLÁNOVÁ<sup>2</sup>, K. STEJSKAL<sup>1</sup>, F. HLÁVKA<sup>1</sup>, V. ADAM<sup>1</sup>, L. TRNKOVÁ<sup>2</sup>, J. ZEHNÁLEK<sup>1</sup>, R. KIZEK<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Mendelova zemědělská a lesnická univerzita v Brně, Masarykova univerzita

<sup>2</sup>Masarykova univerzita

Korešpondenční autor: *kizek@sci.muni.cz*

Plynné, kapalné i pevné složky prostředí, ve kterém se rostlinné organismy vyvíjejí, jsou velmi pestrou směsí stovek chemických sloučenin, z nichž některé mohou mít výrazně inhibiční až toxické účinky. Jednou ze skupin takových látek jsou perzistentní organochlorové pesticidy a jejich metabolity (např. HCH a DDT). V posledních letech bylo provedeno mnoho praktických pokusů pěstování různých druhů rostlin v kontaminovaných oblastech. Většina těchto experimentů však nebyla podložena výsledky výzkumu v menším měřítku (např. laboratorními pokusy, skleníkovými pokusy), které by dokumentovaly chování rostlinných druhů v kontaminovaném prostředí a pomohly tak rychleji vybrat ty rostlinné druhy, které jsou schopné v takovém prostředí nejen přežít, ale též účinně metabolizovat organické polutanty. V naší práci nás zajímalo, jak ovlivňuje  $\beta$ -HCH, ve funkci stresového faktoru, rostliny kukuřice. Především jsme se zaměřili na pozorování růstu a obsahu thiolových látek (cysteinu Cys, redukovaného GSH a oxidovaného GSSG glutathionu, a fytochelatinu PC2). Z experimentu jsme zjistili že  $\beta$ -HCH má vliv nejen na klíčivost obilí kukuřice, ale také na růst rostlin kukuřice, kde velmi intenzivně stimuluje růst rostlin. Bylo také pozorováno, že při vysokých koncentracích tvoří rostliny kukuřice méně biomasy a přijímají více vody. V dalších experimentech byl studován obsah thiolových látek v nadzemních částech rostliny a v kořenech. Nejvyšší koncentrace GSH 25  $\mu$ M byl detekovaná 5. den experimentu v nadzemních částech rostlin vystavených působení 0.7 nM organických polutantů. Obecně lze říci, že v porovnání s kontrolou byly obsahy thiolových sloučenin v rostlinách zvýšené a také byly pozorovány mírně zvýšené obsahy jednotlivých thiolů kořenech v porovnání s nadzemními částmi rostlin.

Práce na tomto projektu byla podporována granty INCHEMBIOL MSMT 0021622412, 1M06030.

[1] T. Macek, M. Mackova and J. Kas Exploitation of plants for the removal of organics in environmental remediation, *Biotechnol. Adv.* 18 (2000) 23-34.

[2] J. Petrlova, R. Mikelova, K. Stejskal, A. Kleckerova, O. Zitka, J. Petrek, L. Havel, J. Zehnalek, V. Adam, L. Trnkova and R. Kizek Simultaneous determination of eight biologically active thiol compounds using gradient elution-liquid chromatography with

Coul-Array detection, *J. Sep. Sci.* 29 (2006) 1166-1173.

- [3] D. Potesil, J. Petrlova, V. Adam, J. Vacek, B. Klejdus, J. Zehnalek, L. Trnkova, L. Havel and R. Kizek Simultaneous femtomole determination of cysteine, reduced and oxidized glutathione, and phytochelatin in maize (*Zea mays* L.) kernels using high-performance liquid chromatography with electrochemical detection, *J. Chromatogr. A* 1084 (2005) 134-144.

### 5Po-Ut15

#### ARZÉN A PODZEMNÉ VODY AKO ZDROJ PITNEJ VODY

V. PAVLÍK<sup>1</sup>, A. HEGEDUSOVA<sup>2</sup>, O. HEGEDUS<sup>2</sup>

<sup>1</sup>FPV UKF v Nitre, RÚVZ so sídlom v Nitre

<sup>2</sup>Univerzita Konštantína Filozofa, Fakulta prírodných vied, Katedra chémie, Tr. A. Hlinku, 1, 949 74 Nitra

Korešpondenčný autor: pavlik.vlado@gmail.com

Sledovanie obsahu toxických látok v životnom prostredí, ktoré svojou prítomnosťou môžu spôsobiť ohrozenie či poškodenie ľudského organizmu či ekosystémov, je dnes čím ďalej, tým viac aktuálne.

Priemyselné exhaláty a popol, vznikajúci spaľovaním fosílnych palív ako aj poľnohospodárska činnosť sú jedným z najdôležitejších zdrojov znečistenia ovzdušia a vôd arzénom. Ďalším, no nie menej dôležitým faktorom je jeho výskyt v geologickom podloží. Výskyt arzenu vo vodách určených na pitie si vynucuje pozornosť získavania a sledovania vody z hlbinných vrtov. Arzén je toxický prvok a jeho

zlúčeniny vykazujú karcinogénne, mutagénne a teratogénne účinky. Do úvahy musíme brať aj jeho značnú schopnosť akumulovať sa v riečnych sedimentoch a vodných organizmoch.

Obvyklý výskyt arzenu v prírodných vodách sa pohybuje v koncentráciách až desiatkach  $\mu\text{g.l}^{-1}$ . Najvyššia prípustná medza v pitných vodách je  $10 \mu\text{g.l}^{-1}$ . [1] Pri stanovení arzenu v podzemných vodách je veľmi dôležitou požiadavkou hodnota medze detekcie a medze stanovenia. V predkladanej práci sme použili metódu stanovenia arzenu atómovou absorpčnou spektrometriou so Zeemanovou korekciou pozadia za použitia modifikátora. Jej platnosť sme si overili validáciou. Metóda je dostatočne rýchla a vhodná na rutinnú analýzu.

Overenou metódou sme sledovali výskyt arzenu v podzemných vodách. Na analýzy sa použili vzorky vôd z individuálnych zdrojov a z artézskych studní z územia Nitrianskeho kraja. Analýzou vzoriek podzemných vôd v artézskych studniach sme zistili, že obsah arzenu je v mnohých prípadoch nad povolenú medznú hodnotu. Vzhľadom na jeho toxické vlastnosti je dôležité

monitorovať vyššie uvedené zdroje, nakoľko slúžia na zásobovanie obyvateľstva pitnou vodou.

- [1] Nariadenie vlády SR z 10.mája 2006, ktorým sa ustanovujú požiadavky na vodu určenú na ľudskú potrebu a kontrolu kvality vody určenej na ľudskú potrebu. Zbierka zákonov č.354/2006.

### 5Po-Ut16

#### INFLUENCE OF SELENIUM COMPOUNDS ON GERMINATION AND GROWING PROCESS IN PISUM SATIVUM L.

A. VARGOVÁ<sup>1</sup>, S. ŠIMKOVÁ<sup>2</sup>, O. HEGEDUS<sup>1</sup>, A. HEGEDUSOVA<sup>1</sup>, K. JOMOVÁ<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Konštantína Filozofa, Fakulta prírodných vied, Katedra chémie, Tr. A. Hlinku, 1, 949 74 Nitra

<sup>2</sup>Univerzita Konštantína Filozofa v Nitre

<sup>3</sup>Katedra chémie, Fakulta prírodných vied, Univerzita Konštantína Filozofa, Nitra

Korešpondenčný autor: avargova@ukf.sk

In this work we studied germination dynamics of garden pea seeds (*Pisum sativum* L.) influenced with selenium solutions and we analyzed opportunity of selenium intake to plant organism by selenium supplementation, as well. Germination experiments were established in Petri's dishes (100 pea seeds, filter paper, distilled water or Se solution in each variant). The dynamics of germination was observed during one week. Quantity of sprouts was counted two times a day. Our results showed that influence of selenium supplements to inhibition of germination process was not observed.

Moreover we observed the effect of two concentrations of sodium selenate solutions ( $1 \text{ mg Se.dm}^{-3}$  as a variant I and  $3 \text{ mg Se.dm}^{-3}$  as variant II) on possible phytotoxicity effect on biomass production in young green plants. Experiments were established in glass troughs. Plant material was collected after 20 days of growth, the whole young green plants were weighed and the material was separated at roots, shoots and leaves. Selenium content in plant samples was determined by Zeeman graphite furnace atomic absorption spectrometry.

In our experiments based on a total plant weight the influence of Se supplements to biomass growth inhibition was observed. Weight of the control variant was compared to weight of treated variants (mean plant weights were 1.74 g in the control variant, 1.66 g in the variant I and 1.37 g in the variant II). Statistical differences were detected in the samples of variant II. The decreasing of biomass in given variant indicates the potential phytotoxic effect of higher selenium concentration. Our results showed that in variant I selenium content increased approximately 3.7 times in leaves and shoots and 8.5 times in roots. Variant II had 16.5 times higher content of selenium in whole plant organism compared with control variant. Mean Se content



in control variant was the highest in the roots and the lowest in the shoots. The analyzed plants of variants I and II had the highest Se content in shoots and the lowest one in roots.

*This work was supported by the projects VEGA č.1/3540/06 and CGA VI/9/07.*

### 5Po-Ut17

#### CALORIMETRIC AND ELECTROCHEMICAL BIOSENSOR SYSTEMS FOR ONLINE ANALYSIS OF GLYCEROL DURING ITS MICROBIAL CONVERSION TO 1,3-PROPANEDIOL

J. ŠEĎČOVIČOVÁ<sup>1</sup>, P. GEMEINER<sup>1</sup>, V. ŠTEFUCA<sup>2</sup>, J. KATRLÍK<sup>3</sup>, I. VOŠTIAR<sup>4</sup>, V. MASTIHUDA<sup>5</sup>, J. TKÁČ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Dept. of Glycobiotechnology, Institute of Chemistry, Center for glycomics, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, SK-845 38 Bratislava

<sup>2</sup>Institute of Chemical and Environmental Engineering, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava

<sup>3</sup>Department of Pharmaceutical Analysis and Nuclear Pharmacy, Faculty of Pharmacy, Odbojárov 10, Comenius University, SK-832 32 Bratislava

<sup>4</sup>Institute of Biotechnology and Food Science, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Bratislava, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava

<sup>5</sup>Institute of Chemistry, Center for glycomics, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, SK-845 38 Bratislava

Korešpondenčný autor: chemjsef@savba.sk

The increased usage of renewable resources for the production of bulk chemicals is desirable against the background of waning crude oil deposits and objections regarding climatic changes due to raising levels of carbon dioxide. Among suitable compounds for this approach is the monomer 1,3-propanediol (PD) which is used for producing commodity plastics. It can either be synthesized chemically or be obtained by microbial conversion of glycerol. Under anaerobic conditions some bacteria metabolize glycerol and reduce it to PD as part of their normal energy metabolism [1].

For controlling the progress of the bioconversion reliable online analysis is indispensable. Glycerokinase from *Cel lulomonas* sp. was used to develop biosensor based on flow calorimetry [2] and glycerol dehydrogenase from *Cellulomonas* sp. co-immobilized with diaphorase from *Clostridium* sp. was used for the construction of amperometric biosensor [3]. Both systems were used for quantitative analysis of glycerol during bioconversion process. Automatic flow injection analysis devices with both amperometric and calorimetric glycerol biosensor systems were built up and tested during growth on glycerol of PD producing. The systems exhibited good storage and operational stability. No interference with 1,3-propanediol and fermentation medium was observed. The range of

glycerol concentration was extended by developed automatic dilution technique with the aim of automatic online monitoring of microbial process. The analytical systems were able to monitor the bioconversion process in fully automatic way during the whole run with sampling frequency of one sample each 10 min. The characteristics (concentration range, sensitivity, stability and sampling) of both systems were compared.

*This work was supported by the European Commission in scope of BIODIOL project. The BIODIOL project (QLK5-CT-2002-01343) is funded by the European Commission within the 5th Framework Program. The integrated bioprocess development and economical evaluation of BIODIOL also includes partner's work which is not presented here. This work was also supported by a grant from the Slovak Grant Agency for Science VEGA under the Project No. 1/4452/07.*

- [1] Vorlop, K.D., Gemeiner, P., Stloukal, R., Klingenberg, M., Wittlich, P. Process development of microbial production of the bulk chemical 1,3-propanediol from glycerol water as a waste effluent. FP5, Quality of life: Contract No. QLK5-CT-2002-01343.
- [2] Štefuca, V., Voštiar, I., ŠeĎčovičová, J., Katrlík, J., Mastihuba, V., Greifová, M., Gemeiner, P., 2006. Development of enzyme flow calorimeter system for monitoring of microbial glycerol conversion. Appl. Microbiol. Biotechnol. 72, 1170-1175.
- [3] Katrlík, J., Mastihuba, V., Voštiar, I., ŠeĎčovičová, J., Štefuca, V., Gemeiner, P., 2006. Amperometric biosensors based on two different enzyme systems and their use for glycerol determination in samples from biotechnological fermentation process. Anal. Chim. Acta 566, 11-18.

### 5Po-Ut18

#### DEGRADACE METHYL TERT-BUTYL ETHERU (MTBE) V BIOREAKTORU.

R. LEHNERT, P. GAVLASOVÁ, G. KUNCOVÁ, J. BOLYÓ

*Institute of Chemical Process Fundamentals, Academy of Sciences of the Czech Republic, Rozvojova 135, 165 02 Prague 6*

Korešpondenčný autor: bolyo@icpf.cas.cz

Mikrobiální degradace methyl tert-butyl etheru probíhala v biorektoru s náplní siranových kuliček a válečků a 2 litrů Lauria Bertani (LB) media (Obr. 1). Byly provedeny dvě následné degradace s rozdílným způsobem přívodu kyslíku v průběhu kultivace a imobilizace směsné kultury mikroorganismů. První degradaci (D1) předcházela aerace vzduchem zatímco před druhou degradací (D2) byl bioreaktor probubláván čistým kyslíkem z tlakové lahve. Na začátku degradace a na jejím konci byly pozorovány změny ve složení směsi mikroorganismů a v průběhu celého experimentu byl sledován pokles koncentrace MTBE. V D1 klesla koncentrace MTBE o 40 %

(28 dní; počáteční pH 6,997 a konečné pH 6,600) a v D2 (57 dní; poč. pH 6,671 a konečné pH 5,230) poklesla koncentrace MTBE o 87 %.

*Tato práce byla prováděna jako součást projektu č. 104/05/2637, Technologie odstraňování methyl tert-butyl etheru z vody, financovaném Grantovou Agenturou České Republiky.*



Obr. 1: Náplňový bioreaktor se siranovými kuličky a válečky.

#### 5Po-Ut19

### VALIDÁCIA ANALYTICKEJ METÓDY ET-AAS PRE STANOVENIE SELÉNU A KADMIA

S. ŠIMKOVÁ<sup>1</sup>, J. ŠVIKRUHOVÁ<sup>2</sup>, O. HEGEDUS<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Univerzita Konštantína Filozofa v Nitre

<sup>2</sup> Univerzita Konštantína Filozofa, Fakulta prírodných vied, Katedra chémie, Tr. A. Hlinku, 1, 949 74 Nitra

Korešpondenčný autor: [ssimkova@ukf.sk](mailto:ssimkova@ukf.sk)

Pre zistenie správnosti analytických metód je dôležité pred ich použitím overiť, či sú vhodné pre účel ich použitia. V príspevku hodnotíme jednotlivé štatistické

charakteristiky (zhodnosť, správnosť, medzu detekcie a stanovitelnosti a štandardnú kombinovanú neistotu) analytickej metódy pomocou atómovej absorpčnej spektrometrie (ET-AAS), ktorú používame na stanovenie obsahu selénu a kadmia v pôdnych a rastlinných vzorkách.

Validácia sa vykonala pre atómovú absorpčnú spektrometer SpectrAA-200 (Varian, Mulgrave Virginia, Australia) a zvolenou technikou bola elektrotermická atomizácia s deutériovou kompenzáciou pozadia s modulom GTA-100. Techniku sme testovali na analýzu vodných roztokov, slepých pokusov a certifikovaných referenčných materiálov (CRM). Výsledkom validácie metódy ET-AAS na stanovenie selénu a kadmia bolo, že metóda ET-AAS je na základe stanovených požiadaviek dostatočne citlivá na a schopná prinášať presné, správne a reprodukovateľné výsledky pre menej komplikované matrice vodných roztokov pri stanovení selénu. Na výsledok stanovenie kadmia metódou ET-AAS nevyplýva zložitosť matrice.

- [1] HEGEDŮS, O. et al., 2005. Evaluation of the ETA-AAS and HG-AAS Methods of Selenium Determination in Vegetables. In Chem. Listy, roč.99, 2005, s. 518-524. ISSN 0009- 2770.

#### 5Po-Ut20

### VÝBER MIKROORGANIZMOV SCHOPNÝCH BIOTRANSFORMÁCIE BROMOVANÝCH LÁTKO A TESTOVANIE LAKÁZOVEJ AKTIVITY

B. UHNÁKOVÁ<sup>1</sup>, V. VEJVODA<sup>2</sup>, M. RÁZGA<sup>2</sup>, O. ŠVEDA<sup>2</sup>, L. MARTÍNKOVÁ<sup>2</sup>, V. KŘEN<sup>2</sup>

<sup>1</sup> AV ČR Mikrobiologický Ústav Videnská 1083, Praha 4 142 20

<sup>2</sup> Centrum Biokatalýzy a Biotransformácie, Mikrobiologický ústav, v.v.i., Akadémie Vied Českej Republiky, 142 20 Praha 4

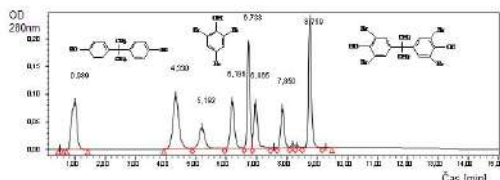
Korešpondenčný autor: [brona@biomed.cas.cz](mailto:brona@biomed.cas.cz)

Bromované spomaľovače horenia (Brominated flame retardants; BFRs) sa pridávajú do rôznych druhov materiálov a výrobkov na spomalenie horenia, hlavne do elektrických a elektronických prístrojov (TV, pračky, počítače, mobilné telefóny a pod.). Vyznačujú sa vysokým stupňom akumulácie v sedimentoch a živých organizmoch a negatívnym vplyvom na endokrinný i nervový systém. Jedným z najpoužívanejších aditívnych bromovaných zbrzdovačov horenia je tetrabromobisfenol A (TBBPA), v menšej miere sa ako reaktívny intermediate do spomaľovačov horenia používa 2,4,6-tribromofenol (TBP). Mikrobiálny metabolizmus TBBPA v sedimentoch prebieha v dvoch krokoch - anaeróbnom (debromácia na bisfenol A (BPA)) a následnom aeróbnom (rozštiepenie BPA na medziprodukty a ich mineralizácia) [1]. Mikroorganizmy degradujúce TBBPA však neboli identifikované a zatiaľ neboli publikované ani informácie o mikrobiálnej transformácii bromofenolov, dibromofenolov či TBP. V našej práci sa venujeme skúmaniu

rozkladu TBBPA, bromovaných fenolov a BPA pomocou pôdných baktérií rodu *Rhodococcus* a drevokazných húb rodov *Pleurotus* a *Trametes*. Na sledovanie koncentrácií substrátov a metabolitov bola použitá modifikovaná HPLC metóda (podľa [1]) pre reverznú monolitickú kolónu (viz Obr. 1). Drevokazné huby sa ukázali ako perspektívne biodegradéry fenolických polutantov vďaka tomu, že vykazujú lakázovú aktivitu. Lakázy (EC 1.10.3.1) sú enzýmy s tromi kationmi Cu, ktoré katalyzujú oxidáciu širokeho spektra fenolov a ďalších substrátov [2]. Pre zvýšenie jej extracelulárnej produkcie bol použitý 3,4-dimetoxybenzyl alkohol ako induktor, ABTS (2,2'-azino-bis(3-etylbenzotiazolín)-6-sulfónová kyselina) ako mediator transformácie i substrát stanovenia lakázovej aktivity. Kmeňe *Rhodococcus erythropolis* A4 a *Rhodococcus opacus* NH-1 degradovali substráty 2BP, 4BP a 2,6-DBP. *Rhodococcus* sp. 12038 transformoval 2BP, 4BP a *Rhodococcus erythropolis* CCM 2595 len 2BP.

Grantová podpora: Grant Ministerstva školstva Českej republiky (Projekt č. NPVII-2B06151); Mikrobiologický ústav AV ČR, v.v.i. (ústavný vedecký zámer AV0Z50200510 a LC 06010).

- [1] Z. Ronen, A. Abeliovich (2000) *Appl. Environ. Microbiol.* 66, 2372-2377.
- [2] S. Riva (2006) *TRENDS in Biotechnology* 24, 219-226.



Obr. 1 HPLC TBBPA, TBP a ich metabolitov. Podmienky separácie: kolóna Chromolith Flash RP-18e (Merck), gradient 10-100 % metanol v 18 mM octanovom pufru, 2 ml/min; detekcia pri 280 nm. Štandardy: 2-bromfenol (4,33 min), 4-bromfenol (5,19 min), 2,6-dibromf

#### 5Po-Ut21

### GENOTOXICITY OF PYROMETALLURGICAL WASTE MATERIALS

J. LEŠKOVÁ<sup>1</sup>, K. MALACHOVÁ<sup>2</sup>, Z. PAVLÍČKOVÁ<sup>3</sup>

<sup>1</sup>VŠB - Technická univerzita Ostrava Centrum nanotechnológií

<sup>2</sup>Department of Biology and Ecology, University of Ostrava, Dvořákova 7, 701 03 Ostrava

<sup>3</sup>Katedra biologie a ekologie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita v Ostravě, 30 dubna 22, 701 03, Ostrava

Korešpondenčný autor: jana.leskova@vsb.cz

Waste materials sampled from electrofilters and wet scrubbers purificating waste gases coming out from pyrometallurgical plants (oxygen converter (OC), open-heart furnace (OHF), blast furnace (BF), and electric arc furnace (EAF)) were investigated in term of PAHs content and mutagenic potential. Low combustion efficiency in furnace environment may cause hydrocarbons, including PAHs to be formed and emitted with the furnace exhaust [1]. These materials are dangerous mainly due to high content of heavy metals and presence of fine and even ultra-fine particles. Nonetheless, content of organic pollutants (PAHs, PCBs) cannot be neglected. Air and soil contamination may occur, thus these materials represent elevated long-term risks of genotoxicity for living organisms including humans. As a part of comprehensive evaluation, mutagenicity of extractable organic matter by using two detection systems the SOS Chromotest and the Ames Salmonella typhimurium His- test with and without metabolic activation was assessed. According to the experimental results, the highest mutagenicity after the activation was observed for the OC sludge. Nonetheless, other samples were potentially mutagenic as well. The bioassays without activation revealed no mutagenicity, thus we can assume that the samples do not contain any direct mutagens. However, they pose risk to higher organisms in which metabolic PAHs conversion occurs. Due to the fact, that the production of these wastes in Moravian-Silesian region reaches up to hundred of thousands of tons annually, therefore the mutagenicity testing is necessary to protect environment against potential adverse effects.

The projects GACR 106/07/1436 and GACR 104/05/2296 funding this study are gratefully acknowledged.

- [1] U.S. EPA 1998. Locating and estimating air emissions from sources of polycyclic organic matter. EPA-454/R-98-014.

#### 5Po-Ut22

### SORPTION-DESORPTION CHARACTERIZATION OF CELL WALL B-D-GLUCAN FROM SACCHAROMYCES CEREVISIAE TOWARD PCP

M. PAJTINKA<sup>1</sup>, Z. SEJÁKOVÁ<sup>2</sup>, P. ZAJKOSKA<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Chemický ústav SAV

<sup>2</sup>Department of Biochemical Technology, Institute of Biotechnology and Food Sciences, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava

Korešpondenčný autor: *chemmapa@savba.sk*

Occurrence of polychlorinated biphenyls (PCBs) represents serious environmental risk due to their widespread occurrence, toxicity, and recalcitrance. As a model compound of PCBs for investigation of their possible elimination mechanisms was used pentachlorophenol (PCP). PCP sorption-desorption investigation was performed using insoluble yeast glucan isolated from the cell walls of *Saccharomyces cerevisiae* ( $\beta$ -d-glucan). PCP sorption isotherm shows the major amount of pollutant is adsorbed during the first hour of sorption process. After one hour of sorption process  $\beta$ -d-glucan reached 90% or higher efficacy depending on certain experimental conditions, amount of used sorption material and tested pollutant. In the sorption-desorption experiments, when the sorbent with the bound PCP was eluted with water (pH 4.0), all desorption parameters for  $\beta$ -d-glucan were up to 3%. Three days desorption process proves there is a minimal PCP desorption increase in comparison with 24 hours experiment.

For a comparison, another fungal polysaccharide from the mycelium of filamentous fungus *Aspergillus niger* (chitin-glucan complex, CG) and its carboxymethylated derivative (CM-CG) were used as well. Microcrystalline cellulose (MC) was used as another glucan matrix for comparison with the yeast  $\beta$ -d-glucan.  $\beta$ -d-Glucan revealed significantly better sorption ability towards PCP than CG and CM-CG. The sorption data obtained with MC were up to 28 % lower than those observed for yeast glucan at the same conditions.

This significant difference can be explained by the fact that while cellulose is a linear molecule, yeast  $\beta$ -d-glucan adopts triple helical conformation, which might more tightly enclose the PCP molecule.

*Financial support from the Grant Agency of Ministry of Education of Slovak Republic and Slovak Academy of Sciences, grants VEGA 2/7033/7, and by the grant of the Company Alltech, Inc., Nicholasville, KY is gratefully acknowledged.*

### 5Po-Ut23

#### BIODEGRADACE HERBICIDŮ LIGNINOLYTICKÝMI HOUBAMI

P. ZACHAŘ<sup>1</sup>, Č. NOVOTNÝ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>VŠCHT Praha

<sup>2</sup>Mikrobiologický ústav AV ČR, Vídeňská 1083, 142 20 Praha 4

Korešpondenčný autor: *Pavel.Zachar@vscht.cz*

Deriváty triazolu (bitertanol, flutriafof aj.) a deriváty atrazinu (atrazin, propazin, desmetrin aj.) patřily v 90. letech, a do značné míry stále ještě patří, k nejdůležitějším skupinám herbicidů, přípravků k ošetření porostů např. kukuřice a cukrovky. Mezi nejvýznamnější patřil atrazin (známý pod obchodními názvy Gesaprim,

Zeazin, Aktinit, Fenatrol, Guardian Extra aj.) a simazin (přípravek Gesatop). Spotřeba těchto herbicidů v roce 2002 činila v ČR několi set tun. Atrazin narušuje vodní a půdní organismy a u vyšších živočichů včetně člověka poškozuje hormonální systém. Karcinogenní účinky atrazinu nebyly jednoznačně prokázány, ale byly prokázány účinky mutagenní. Proto bylo jeho používání směrnici evropské komise (2004/248/EC) k 1. srpnu 2005 zakázáno a v zemědělství je snaha nahradit tento pesticid některými méně závadnými, jako desethylatrazin, terbuthylazin a zejména metamitron (asymetrický 1,2,4-triazin s obchodním názvem Tornado, Mitra, Gól, Goltix Top aj.). Množství těchto herbicidů v půdách je stále značné a splachem se dostávají do povrchových i pitných vod. Vyhláška ministerstva zdravotnictví (376/2000) stanoví v pitných vodách pro každý z podobných triazinových herbicidů, včetně atrazinu, nejvyšší meznou hodnotu 100 ng/l. V pražské vodovodní síti byla dle údajů Pražských vodovodů a kanalizací v roce 2006 při třistačtyřiceti stanoveních průměrná hodnota 11,7 ng/l pro atrazin, 17,5 ng/l pro desethylatrazin a 10,7 ng/l pro terbuthylazin. Z uvedených důvodů jsou stále hledány způsoby dekontaminace vody obsahující triazinové herbicidy. Vedle fotokatalytické degradace (UV, TiO<sub>2</sub>) - viz (1) a degradace s použitím peroxidu vodíku - (2) se jako velmi nadějná (i z hlediska nákladů) jeví biodegradace pomocí dřevokazných hub - hub bílé hniloby, zejména houby *Irpex Lacteus*, jak je uvedeno v tomto příspěvku. Tato práce navazuje na naše předchozí práce v oblasti biodegradací, kde byla pomocí dřevokazných hub studována degradace průmyslově používaných barviv (3).

*Tato práce vznikla za finanční podpory grantu AV ČR IAA6020411*

- [1] Krýsová H. a spol.: Chem.Listy 94, 993 (2002)
- [2] Rodríguez E.M. a spol.: Chemosphere 54, 71 (2004)
- [3] Zachař P., Novotný Č.: Chem.Listy 100, 721 (2006)

### 5Po-Ut24

#### VÝSKUM BIOAKTIVNÝCH LÁTOK PRODUKOVANÝCH ENDOFYTICKÝM MIKROORGANIZMOM FUSARIUM SPOROTRICHOIDES.

M. MALIAROVÁ<sup>1</sup>, M. VALACHOVÁ<sup>2</sup>, M. FELČÍR<sup>3</sup>, T. MALIAR<sup>3</sup>

<sup>1</sup>UCM Trnava

<sup>2</sup>VÚP Bratislava, Priemyselná 4, Bratislava 815 26

<sup>3</sup>FPV UCM v Trnave, Nám. J. Herdu 2, Trnava 917 01

Korešpondenčný autor: *maria.maliarova@ucm.sk*

Endofytické mikroorganizmy sú mikroorganizmy asociované s vyššími rastlinami. Tieto mikroorganizmy patria do málo preskúmanej skupiny biosystémov. Doteraz

uskutočnené štúdie naznačujú, že endofyty sú bohatým a zaujímavým zdrojom bioaktívnych a chemicky rôznorodých látok s potenciálom pre využitie v medicíne, poľnohospodárstve a priemysle. Výskum zameraný na hľadanie nových druhov endofytov sa orientuje prevažne na rastliny, u ktorých je známa produkcia bioaktívnych látok, nakoľko endofytické mikroorganizmy majú podobné biochemické procesy ako príslušná hositeľská rastlina, vďaka predpokladanému vertikálnemu transferu genómu. V rámci štúdie bolo izolovaných vyše 260 endofytických mikroorganizmov z rôznych rastlinných zdrojov. Najvýraznejšie biologické účinky vykazoval kmeň, neskôr identifikovaný ako *Fusarium sporotrichoides*, izolovaný z *Ginkgo biloba*, s výrazným cytotoxickým a proteínázou inhibičným účinkom. Metódou HPLC bol analyzovaný hrubý extrakt kultivátu endofytu, jeho parciálne purifikované frakcie a extrakt materskej rastliny.

Táto práca vznikla za finančnej podpory ŠP VaV 2003SP270800E010280E01

- [1] Strobel G.A.: *Can. J. Plant Pathol.* 24, 14 (2002).
- [2] Strobel G.A., Daisy B., Castlillo U., Harper J.: *J. Nat. Prod.* 67, 257 (2004).
- [3] Valachová M., Múčková M., Šturdíková M.: *Chemické listy*, 101, 486 (2007).

#### 5Po-Ut25

### PRÍRODNÁ REZERVÁCIA ŽITAVSKÝ LUH - SLEDOVANIE DYNAMIKY ZMIEN VYBRANÝCH FRAKCIÍ SÍRY V PÔDACH

M. FESZTEROVÁ<sup>1</sup>, L. JEDLOVSKÁ<sup>2</sup>, A. ZAUJEC<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Konštantína Filozofa, Fakulta prírodných vied, Katedra chémie, Tr. A. Hlinku, 1, 949 74 Nitra

<sup>2</sup>Katedra environmentalistiky a zoológie, Fakulta agrobiológie a potravinových zdrojov, Slovenská poľnohospodárska univerzita, Tr. A. Hlinku 2, 949 76 Nitra

<sup>3</sup>Katedra pedológie a geológie, Fakulta agrobiológie a potravinových zdrojov, Slovenská poľnohospodárska univerzita, Tr. A. Hlinku 2, 949 74 Nitra

Korešpondenčný autor: [mfeszterova@nexta.sk](mailto:mfeszterova@nexta.sk)

Podmienky pre existenciu rastlinných a živočíšnych organizmov vytvára pôda. V príspevku rozširujeme poznatky o dynamike zmien vybraných frakcií síry v závislosti od pôdnych typov, rôznych hĺbok odberov a vplyvu podmienok prostredia v Prírodnej rezervácii Žitavský luh. Žitavský luh predstavuje v Požitaví najväčší celok aluviálnych lúčnych porastov a močiarnych spoločenstiev. Vegetácia rezervácie súvisí s celým komplexom spoločenstiev, ktoré ovplyvňuje tok Žitavy. Vysoká hladina podzemnej vody ovplyvňuje hydrofyzikálne vlastnosti pôdy, ktorá je v najnižších častiach pôdneho profilu

neustále ovplyvnená jej prítomnosťou. [3] Procesy mineralizácie a resyntézy organických frakcií síry, ktoré prebiehajú v pôde sme pozorovali na základe analyzovaných výsledkov počas celého sledovaného obdobia. Dôkazom toho bol zvýšený obsah síranovej frakcie síry v podorničnej vrstve.[1], [2] Človek zasahuje do tohto prírodného prostredia neuváženým vysušovaním a to odvodnením a reguláciou vodných tokov. Hodnotami, ktoré sme získali z dvojročného obdobia (2005 - 2006) by sme chceli prispieť k dôkladnejšej charakterizácii pôdneho pokryvu územia.

Publikovaný príspevok bol spracovaný v rámci riešenia projektov VEGA 1/4432/07 a CGA VI/2/2007.

- [1] JEDLOVSKÁ, L. - FESZTEROVÁ, M. Dynamika zmien vybraných frakcií síry v rôznych pôdnych typoch. In: Aktuálne problémy riešené v agrokomplexe, zborník z X. ročníka medzinárodného vedeckého seminára, Nitra, 2004, 14 s. ISBN 80-8069-477-8
- [2] JEDLOVSKÁ, L. - FESZTEROVÁ, M. Dynamika zmien vybraných frakcií síry v pôdach Prírodnej rezervácie Žitavský luh. In História, súčasnosť a perspektívy ochrany prírody v CHKO Ponitrie : zborník z konferencie pri príležitosti 20. výročia vyhlásenia CHKO Ponitrie. Nitra : Tribeč - základná organizácia SZOPK v Nitre, 2006, s. 369-373. ISBN 80-900489-8-6.
- [3] ZAUJEC A. et al. Pedológia. Nitra: SPU, 2002, s. 71. ISBN 80 -8069-090-1

#### 5Po-Ut26

### ENVIRONMENTÁLNI ASPEKT POUŽITÍ JEČMENNÉHO HYDROLYZÁTU NOVÉ GENERACE PRO VÝROBU PIVA

T. ZOUFALÝ<sup>1</sup>, P. BRYNYCH<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Výzkumný ústav pivovarský a sladařský, a.s.

<sup>2</sup>Ing Petr Brynych Beer Consulting

Korešpondenčný autor: [zoufaly@beerresearch.cz](mailto:zoufaly@beerresearch.cz)

VUPS vyvinul metodu pro výrobu obilného hydrolyzátu, který je určený především pro použití k surogaci v pivovarství. Jedná se o řízenou enzymatická hydrolyza škrobu a dalších makromolekulových komponent ječmene pro výrobu hydrolyzátu a jeho koncentrátu. K modelovým řízeným hydrolyzám byly vybrány enzymové preparáty - hydrolasy (nejdůležitější amylasy a proteasy). Po ukončení hydrolyz ječmene v poloprovozním reaktoru a separaci pevného podílu ječmene, byly odděleny kaly na rotační odstředivce a hydrolyzát byl zahuštěn na vakuové odparce na koncentraci sušiny 65 %hm. Z vybraných pokusných partií ječmenných hydrolyzátů byla

připravena piva. U vzorku jednoho piva činil podíl koncentráta na sypání 51 %hm., u vzorku druhého piva činil 76 %hm. Piva byla při vědecké rozpravě hodnocena velmi kladně jako lehčí světlé pivo. Oproti běžně dostupným cukerným sirupům, kde výrazně převládá glukosa, autoři řízením enzymatické hydrolyzy optimalizovali poměr maltosy a glukosy, který je v hydrolyzátu obdobný jako v běžné sladidě ( u vybraných hydrolyzátů obsah maltosy 65,3 , resp. 63,3 mg/ml, obsah glukosy 36,2, resp. 26,8 mg/ml). Z důvodu využití v pivovarství byla pozornost při řízení hydrolyzů věnována obsahu alfa-aminodusíku v hydrolyzátech. Dosažitelná prokvašení 87,4 %, resp. 84,4 %, resp. 85,3 % jsou příznivá. Pšeničný hydrolyzát vykázal obsah alfa-aminodusíku 129,7 mg/l. Postup výroby hydrolyzátů a jejich následné zahuštění byly patentovány. Použití hydrolyzátů při nové generace pro výrobu piva reprezentuje de facto bezodpadovou technologii s výrazným omezením tvorby hlavního odpadového materiálu - pivovarského mláta.

*Některé výsledky byly získány na základě Výzkumného záměru „Výzkum sladařských a pivovarských surovin a technologií“, identifikační kód : MSM6019369701, poskytovatel MŠMT ČR, a dále v rámci řešení projektu č. QF3297 MZe ČR.*

- [1] Štancl, J., Zoufalý, T. et al.: Řízená enzymatická hydrolyza škrobu a dalších makromolekulových komponent ječmene (obilovin) pro výrobu koncentráta a jeho následné průmyslové využití. Závěrečná zpráva k projektu č. QF3297 MZe ČR, VUPP a VUPS, Praha 2005.
- [2] Brynych, P., Zoufalý, T.: Ječmenný hydrolyzát nové generace pro výrobu piva, 33. Pivovarsko-sladařský seminář, Plzeň 18.-19.10.2006.
- [3] Patent č. 297 950 „Způsob výroby obilných extraktů enzymatickou hydrolyzou“, Úřad průmyslového vlastnictví ČR, 2007.

## Plenárne prednášky

### MOŽNOSTI CHARAKTERIZÁCIE A KLASIFIKÁCIE ÚDAJOV CHEMOMETRICKÝMI TECHNIKAMI

J. MOCÁK

*Univerzita sv. Cyrila a Metoda v Trnave, Fakulta prírodných vied, Kat-  
edra chémie*

Korešpondenčný autor: [jan.mocak@stuba.sk](mailto:jan.mocak@stuba.sk)

**Súhrn:** Práca podáva prehľad o možnostiach využitia mnohorozmernej analýzy dát a príbuzných chemometrických techník najmä v oblastiach využitia analýzy

klinických, farmaceutických a potravinárskych vzoriek. Zaoberá sa tiež novými možnosťami využitia mnohorozmernej regresnej analýzy, najmä na zistenie kvantitatívnych vzťahov medzi štruktúrou, aktivitou a vlastnosťami chemických zlúčenín. Ukazuje efektívne spojenie modernej inštrumentácie, zahrnujúcej separáciu analyzovaných zložiek a ich kvantitatívnu analýzu, s klasifikačnými technikami mnohorozmernej analýzy dát s využitím moderného komerčného softvéru.

**KLúčové slová:** mnohorozmerná analýza dát, kardiovaskulárne markery, tumorové markery, autentifikácia, QSAR, mykobaktérie

#### 1. Úvod

Metódy *mnohorozmernej (multivariantnej) analýzy dát, MDA*, používajú mnohorozmernú štatistiku a numerickú matematiku na vyšetrovanie vzťahov a interakcií vo veľkej tabuľke dát [1-3]. MDA v súčasnosti predstavuje hlavný prúd *chemometrie*, ktorá je charakterizovaná ako interdisciplinárny vedný odbor, využívajúci štatistiku, matematiku a informatiku na spracovanie, klasifikáciu, interpretáciu a predikciu údajov, potrebných na zhodnotenie chemickej informácie. Vďaka značnému zovšeobecneniu a abstrakcii chemometrických metód možno veľmi podobným spôsobom hodnotiť, charakterizovať a klasifikovať rozličné *chemické*, ako aj *klinické, farmaceutické, potravinárske, environmentálne* a iné údaje. Chemometrické techniky MDA odкрývajú vzájomné latentné súvislosti medzi skúmanými *objektami* (napr. vzorkami krvi alebo biologicky aktívnymi zlúčeninami, prípadne vzorkami vína, a i.), medzi použitými *premennými* čiže *deskriptormi* (ktoré predstavujú merané alebo pozorované charakteristiky objektov), a tiež medzi *objektami* a *premennými*.

V tejto práci uvedieme viaceré príklady chemometricky riešených problémov z oblasti klinickej, farmaceutickej a potravinárskej analýzy, ktoré sú spracované formou prípadových štúdií a v ktorých sa budú demonštrovať možnosti a výhody MDA a podobných chemometrických techník. Príkladom sú nasledujúce problémy:

- (1) Vzťahy medzi klinickými laboratórnymi dátami a kardiovaskulárnym ochorením .
- (2) Vzťahy medzi klinickými laboratórnymi dátami a onkologickým ochorením .
- (3) Korelačná a regresná analýza chemických a biologických vlastností *N* - benzyl-salicylamidov a využitie mnohorozmernej analýzy dát na štúdium ich biologickej aktivity.
- (4) Klasifikácia a autentifikácia slovenských vín.
- (5) Charakterizácia a klasifikácia jedlých olejov.

#### 2. Princíp a rozdelenie metód mnohorozmernej analýzy dát

Základom mnohorozmernej analýzy dát je dátová *tabuľka*, ktorá má od niekoľko desiatok až po niekoľko stotisíc prvkov a často je veľmi rozsiahla (najmä v prí-



padoch, ak deskriptormi sú inštrumentálne údaje, napr. spektrálne). Riadky tabuľky sa vzťahujú na *objekty* a stĺpce na *premenné* [3]. Obvykle sa skúma väčší počet  $n$  objektov, charakterizovaných menším počtom  $p$  vybraných premenných, či vlastností. Každý jeden objekt si potom možno predstaviť ako bod v  $p$ -rozmernom priestore vlastností, z čoho vyplýva *mnohorozmernosť* analyzovaných dát, pretože každý stĺpec definuje jeden rozmer. Všeobecne možno povedať, že objekty, ktoré sú v  $p$ -rozmernom priestore blízko seba, sú si podobné, zatiaľ čo vzdialené objekty sú navzájom odlišné (s prihliadnutím na uskutočnený výber premenných). Viaceré metódy MDA sú schopné pracovať aj s diskretnými (diskontinuálnymi) premennými popri obvyklejšie používaných spojitých (kontinuálnych) premenných. Teda napr. pri klasifikácii klinických vzoriek možno brať do úvahy aj dotazníkovým štýlom získané informácie, akú napr. pri určovaní kardiovaskulárneho rizika predstavuje odpoveď na otázku fajčiar/nefajčiar alebo muž/žena (kritické hodnoty viacerých klinických testov závisia od pohlavia vyšetrovanej osoby).

Pri chemometrickom spracovaní sa z tabuľky pripraví *matica dát*, ktorej detaily závisia od požiadaviek používaného softvéru. Vzhľadom na komplikovanosť výpočtovej problematiky, ako aj optimalizáciu možnosti grafickej vizualizácie výsledkov, väčšinou sa využívajú komerčné softvéry. *Výstupné údaje*, získané po vykonaní výpočtov na základe merania, prípadne aj subjektívneho hodnotenia *faktov*, sa napokon transformujú na *informáciu* potrebnú k formulácii príslušného *rozhodnutia*. V reťazi *fakty - dáta - informácia - rozhodnutie*, významnú úlohu má spätná väzba, zaradená v jednotlivých stupňoch procesu od získania vzorky až po konečnú výpoveď, a umožňujúca napr. optimalizovať spôsob zberu dát alebo „vyladiť“ získanú informáciu.

Metódy MDA možno rozdeliť napr. na *zobrazovacie metódy* a *klasifikačné metódy*. Cieľom *zobrazovacích metód* je výpočet nových premenných z pôvodných premenných, pričom v podstate ide o geometrický prístup, keďže dáta sa pomocou nových premenných skúmajú s použitím vhodnej projekcie či reprezentácie. Významnou výhodou zobrazovacích metód je, že nové premenné sú hierarchicky usporiadané, takže v súradnom systéme pomerne malého počtu nových premenných (napr. v troch dimenziách) možno bez väčšej straty informácie získať prirodzené zobrazenie vzájomnej polohy objektov a prípadne aj pôvodných premenných.

Cieľom *klasifikačných metód* je zaradiť objekty a niekedy aj premenné do *tried*, resp. *skupín* či *kategórií* tak, aby sa získali homogénne zoskupenia objektov (alebo aj premenných). V prípade klasifikačných metód v prvom rade ide o vytvorenie kvalitného klasifikátora (klasifikačného modelu), ktorý dostatočne rozlišuje objekty prislúchajúce rôznym triedam. Pri výpočte modelu je potrebné, aby bolo vopred známe správne zaradenie (kategorizácia) časti objektov. V ďalšom kroku sa klasi-

fikátor použije overenie (validáciu) klasifikačného modelu a napokon na zatriedenie dosiaľ nekategorizovaných objektov, alebo na predpoveď, do ktorej triedy by patril dosiaľ nezaradený objekt, vyznačujúci sa určitými vlastnosťami.

### 3. Prehľad dosiahnutých výsledkov

Zobrazovacie a klasifikačné metódy MDA, spolu s aplikáciou regresných techník a umelých neurónových sietí sa použili na riešenie rozmanitých problémov, dominantne založených na chemických meraniach, ale často presahujúcich hranice chémie. Vykonali sme objektívne hodnotenie diagnostickej výkonnosti kardiovaskulárnych [4] i tumorových markerov [5,6] a našli sme také ich lineárne kombinácie, ktoré sú z diagnostického hľadiska efektívnejšie, než najlepšie individuálne markery. Na určovanie autenticity potravín (a potravín), ktoré v súčasnosti predstavujú kritický stupeň v procese kontroly kvality a bezpečnosti potravín, sme adaptovali klasifikačné techniky MDA, najmä varianty diskriminačnej analýzy, ako aj umelé neurónové siete. Vypracovali sme spôsoby na overenie pravosti odrody, ročníka, prípadne aj výrobcu [7] bielych i niektorých červených vín, ako aj zahraničných jedlých olejov - olivových a tekvicových [8]. Popri tradične využívaných deskriptoroch sme použili aj menej tradičné - napr. absorbancie upravených vzoriek v ultrafialovej, viditeľnej a NIR oblasti spektra alebo plochy príslušných HPLC píkov eluujúcich pri všetkých vzorkách v konštantnom poradí. V týchto prípadoch išlo o vykonanie klasifikácie bez použitia štandardov a prácnej identifikácie píkov chromatogramu, čo významne zlacňuje proces analýzy (aj keď mierne komplikuje chemometrické výpočty).

Vyspelé mnohorozmerné regresné techniky a regresné varianty použitia umelých neurónových sietí sme použili najmä na riešenie farmaceutických a klinických problémov. Išlo napr. o hodnotenie účinnosti produktov metabolizácie morfia u onkologických pacientov a najmä o počítačom podporovaný dizajn liečiv, pričom na štúdium vzťahov štruktúra -vlastnosti sme použili netradičné prístupy, dosiaľ málo využívané v QSAR [9,10]. Zistili sme napríklad, že na predpoveď mykobakteriálnej aktivity skúmaných heterocyklických zlúčenín sú popri iných QSAR premenných vhodné aj chemické posuny simulovaných NMR spektier, pričom predikciu aktivity možno vykonať bez potreby mať príslušné zlúčeniny vopred syntetizované. Dôležitou je aj analýza významnosti jednotlivých premenných a eliminovanie málo významných, ktorá nielenže umožňuje efektívnejší výpočet s menším počtom premenných, ale tiež dopĺňa informácie o mechanizme účinku zlúčeniny ako liečiva.

**Pod'akovanie.** Autor ďakuje za pomoc svojim doktorandom a za finančný príspevok grantom VEGA 1/3584/06 a APVV-0057-06.

### 4. Literatúra

1. Otto M.: *Chemometrics: Statistics and Computer*

*Application in Analytical Chemistry*. Wiley, Weinheim 1999.

2. Brereton R. G.: *Chemometrics: Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant*. Wiley, Chichester 2003.

3. Balla B., Mocák J.: *Lab. diag.* 6 (2001) 10.

4. Balla B., Mocak J., Pivovarnikova H., Balla J.: *Chemometrics Intell. Lab. Systems* 72 (2004) 259.

5. Mocak J., Balla B.: *Chem. Listy* 97 (2003) 736.

6. Balla B., Mocák J., Varmusová E., Kavková D., Tudík I.: *Chem. Listy* 97 (2004) 333.

7. Peřka J., Mocák J., Farkaš P., Balla B., Kováč M.: *J. Sci. Food Agr.* 81 (2001) 1533.

8. Lankmayr E., Mocak J., Serdt K., Balla B., Wenzl T., Bandoniene D., Gfrerer M.: *J. Biochem. Biophys. Meth.* 61 (2004) 95.

9. Netrova J., Johanedisova Z., Brandsteterova E., Lehotay J., Serdt K., Mocak J.: *Pharmazie* 61 (2006) 528.

10. Nemeček P., Ďurčeková T., Mocák J., Lehotay J., Waisser K.: *Nova Biotechnologica* VI-1 (2006) 37.

non-contact calibration of the two parameters - this is important especially when functionalized tips are used for which the standard contact method cannot be applied. An example of a functionalized AFM tip is shown in Fig. 1, where a multi-wall carbon nanotube has been used to functionalize the tip.

The measurement using the functionalized tips have been carried out using the frequency modulation technique which provides quantitative information on the measured forces between the tip and the surface for arbitrary amplitude of the cantilever resonance vibrations (J. Sader et al., *Appl. Phys. Lett.* 84 1801(2004)).

The carbon nanotube functionalized tips and the frequency modulation technique have been used to study the interface between lipid membranes and water; the solvation structures have been investigated and quantitatively analyzed. The results as well as

some possible applications will be presented.

In the presentation, further Siemens PSE live science projects will be briefly introduced:

- RNA Workbench - prediction of RNA interference by which genes can be silenced including some interesting new results.
- Laboratory management for proteomics - system for automatized analysis of proteomic data from mass spectrometry

## BIONANOTECHNOLOGY PROJECT AT ANF DATA

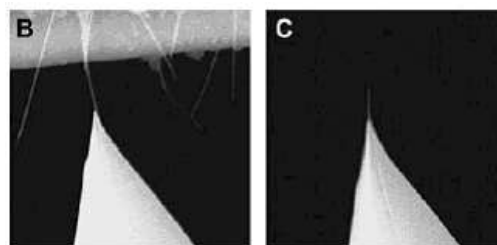
M. POLČÍK

ANF DATA (Siemens)

Korešpondenčný autor: [martin.polcik@siemens.com](mailto:martin.polcik@siemens.com)

ANF DATA (Siemens IT Solutions) has started several projects in life sciences in order to secure future benefits which are expected to be significant in this field in the future. The projects deal with bioinformatics, i.e. the application of computers in biology, and nanotechnology which is closely related to the former via on-chip integration of different devices such as biosensors, micro fuel-cells etc.

In this contribution the bionanotechnology activity in the field of liquid atomic force microscopy (AFM) will be presented. It is a result of a collaboration between Siemens and the group of Prof. S. Jarvis from the Trinity College Dublin, Ireland that targeted biologically relevant applications of AFM. AFM is a powerful method that provides quantitative information about systems such as cells, membranes, DNA etc. in their natural environments - liquids (such as water or buffer solutions) and which can achieve molecular or even atomic resolution. A special method based on the thermal vibrations of the AFM cantilever to calibrate its sensitivity and stiffness has been developed. It enables the user to perform fast and



Carbon nanotube functionalized AFM tip (M.Higgins et al., *Biophys. J.* 91 2532 (2006))

## Prednášky – sekcia 1

### GAS-PHASE AND SOLUTION CONFORMATIONS OF BASIC STRUCTURAL UNITS OF HEPARIN

M. REMKO<sup>1</sup>, C. VON DER LIETH<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Komenského, Farmaceutická fakulta, Katedra farmaceutickej chémie



<sup>2</sup>German Cancer Research Center, Im Neuenheimer Feld 28 0, D-69120 Heidelberg

Korešpondenčný autor: remko@fpharm.uniba.sk

Heparin (HP) and structurally related heparan sulfate are a family of macromolecules (glycosaminoglycans) found in virtually all tissues in a wide variety of species. Sulfo groups in HP appear to play important role in various biological effects of this polymer [1]. Heparin is used in clinics for the prevention and treatment of thrombosis. Its main antithrombotic activity is explained by its ability to potentiate the activity of serine protease inhibitor antithrombin III (AT-III), which inactivates a number of serine proteases - such as thrombin and factor Xa - in the coagulation cascade. The action of anticoagulants starts when they bind to antithrombin through a group of five subunits (DEFGH). In spite of these interesting properties the glycosaminoglycans remain one of the structurally less-well characterized classes of saccharides.

The talk will discuss a) three basic conformations (<sup>4</sup>C<sub>1</sub>, <sup>1</sup>C<sub>4</sub> and <sup>2</sup>S<sub>0</sub>) of the IdoA2S structural unit of heparin (sub-unit G), its anionic forms and sodium salt [2], and b) the structural parameters for four DFT optimized sodium salts of disaccharides (D-E, E-F, F-G and G-H) of the DEFGH structural unit of heparin and their anionic forms [3]. Of particular interest is the overall shape of sodium salts of disaccharides determined by the conformation of the glycosidic linkage and how this shape changes upon sodium cation dissociation and/or in water solution.

The work has been supported by Slovak Grant Agency VEGA contract No 1/4301/07 (M.R.).

- [1] D. A. Lane, U. Lindahl (Eds.). Heparin - Chemical and Biological Properties, CRC Press, Boca Raton, FL, 1989.
- [2] M. Remko, C.-W. von der Lieth, J. Chem. Inf. & Modeling 46 (2006) 1194-1200.
- [3] M. Remko, C.-W. von der Lieth, J. Chem. Inf. & Modeling 46 (2006) 1687-1694.

### A STOCHASTIC MODEL OF CALCIUM-INDUCED CALCIUM RELEASE IN CARDIAC MYOCYTE

P. PETROVIČ<sup>1</sup>, A. ZAHRADNÍKOVÁ<sup>2</sup>, I. ZAHRADNÍK<sup>2</sup>, I. VALENT<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup>Institute of Molecular Physiology and Genetics, Slovak Academy of Sciences, Vlárská 5, 833 34 Bratislava

Korešpondenčný autor: petrovicp@fns.uniba.sk

After depolarization of the cell membrane in heart myocyte, Ca<sup>2+</sup> influx through the voltage dependent

DHPR channels from the extracellular compartment to the dyadic cleft leads to an increase of Ca<sup>2+</sup> concentration that induces opening of calcium-dependent ryanodine receptor channels (RyRs) on the juxtaposed membrane of the sarcoplasmic reticulum (SR) in a nonlinear process known as calcium-induced calcium release (CICR). Opening of the RyRs causes massive release of Ca<sup>2+</sup> from the SR to cytoplasm resulting in cell contraction. In the presented model we numerically simulate the stochastic dynamics of DHPR and RyR gating in the 3D space of the dyadic cleft upon depolarization of the plasma membrane, using the Monte Carlo algorithm [1]. RyRs are coupled in a cluster of 1-49 RyRs with a mutual distance of 28 nm between neighboring RyRs. DHPR channels are accidentally distributed on plane at a distance of 12 nm from the SR membrane. Interactions among the channels are due to steady-state diffusion of Ca<sup>2+</sup> [2].

The model showed gained and graded SR release current (*I<sub>SR</sub>*) in response to the DHPR trigger (3.9 nA peak/76 pA per cell at 0 mV for 49 RyRs in a cluster and 7 DHPR channels). *I<sub>SR</sub>* achieved its peak value in 4.5 ms after membrane depolarization, and then it was significantly reduced to 0.6 nA within 15 ms due to Ca<sup>2+</sup> dependent inactivation of RyRs. This simplified representation will be extended to a complex model of excitation-contraction coupling by linking with a reaction-diffusion model of the dyadic cleft [3].

This work was supported by grant UK139/2007 from Comenius University Bratislava and 51-031104 from Agentúra na podporu výskumu a vývoja, and by the ESF FUNCDYN Programme.

- [1] Fall, Ch., P., Marland, E., S., Wagner, J., M., Tyson, J., J. 2002. Computational Cell Biology, Springer.
- [2] Nguyen, V., R. Mathias, G. D. Smith. 2004. A stochastic automata network descriptor for Markov chain models of instantaneously-coupled intracellular Ca<sup>2+</sup> channels. Bull. Math. Biol. 67: 393-432.
- [3] Valent, I., Zahradníková, A., Pavelková, J., Zahradník I. 2007. Spatial and temporal Ca<sup>2+</sup>, Mg<sup>2+</sup>, and ATP<sup>2-</sup> dynamics in cardiac dyads during calcium release. Biochimica et Biophysica Acta 1768 :155-166.

### CAPILLARY ELECTROPHORESIS - QUESTIONS IN BIOANALYSIS

J. PETR<sup>1</sup>, V. MAIER<sup>1</sup>, J. ZNALEZIONA<sup>1</sup>, O. RYPAROVÁ<sup>1</sup>, M. KOWALSKA<sup>2</sup>, R. KNOB<sup>1</sup>, K. VÍTKOVÁ<sup>1</sup>, V. RANC<sup>1</sup>, J. ŠEVČÍK<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Katedra analytické chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Tř. Svobody 8, 771 46 Olomouc

<sup>2</sup>Univerzita Palackého Olomouc, Prírodovedecká fakulta, Katedra biochemie

Korešpondenčný autor: *petrjan1@gmail.com*

Capillary electrophoresis represents a modern separation technique used in many analytical tasks from separation of small inorganic ions to separation of high molecular mass compounds like proteins and nucleic acids. Two different approaches dealing with bioanalysis are studied in our laboratory. The first deals with on-line pre-concentration methodology developed in our laboratory which is based on the electrokinetic injection of charged analytes to a pH boundary where the analytes are neutralized and preconcentrated (accumulation). After the accumulation, analytes are mobilized and separated by partitioning to the micelles. The second approach covers preliminary studies of electrophoretic behavior of microorganisms, mainly *Escherichia coli* and *Sacharomyces cerevisiae*, that provides high performance analyses (more than 10 millions th.pl./m) with possibilities to screening applications. Some of the questions arisen during the research will be discussed in the presentation.

*The financial support of the Research Project MSM6198959216, and the grant 203/07/P233 is gratefully acknowledged.*

### HIGH RESOLUTION NMR SPECTROSCOPY OF WINE SAMPLES

M. MAZÚR, P. BOŤANSKÁ, K. FURDÍKOVÁ, M. VALKO, M. KALIŇÁK

*Slovenská Technická Univerzita, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav fyzikálnej chémie a chemickej fyziky*

Korešpondenčný autor: *milan.mazur@stuba.sk*

High-resolution NMR spectroscopy has an outstanding position in the field of chemical analysis of food products because it is non-destructive, selective and capable of simultaneous detection of many low molecular mass components in complex wine mixture. The sample preparation for NMR spectroscopy is relatively simple and not time consuming. Another advantage of NMR spectroscopy is the possibility of detecting the magnetic resonances of different nuclei present in a molecule in different electronic and spatial environments.  $^1\text{H}$  NMR spectroscopy can be successfully used for detection of sugars, organic acids, and amino acids present in wine. Unfortunately, the weak signals of the minor compounds in NMR spectra are overlapped by the signals of other compounds present and especially by the dominant signals of water (86 %), ethanol (12 %) and glycerol (1 %). Therefore technique for the suppression of large signals of dominant components is needed. Presented contribution describes the characterization of minor compounds in Slovak wine samples by high resolution  $^1\text{H}$  NMR spectroscopy on a Varian INOVA 600 MHz NMR spectrometer, which is located at the department of NMR and mass spectrometry, Faculty of Chemical and Food Technology, STU in

Bratislava.

*This work was supported by Science and Technology Assistance Agency under the contact No. APVV-20-004504, Slovak State Program Project No. 2003SP200280203 (NMR measurements), and by Slovak Grant Agency for Science (VEGA 1/2450/05 and VEGA 1/3579/06).*

### ANTHOKYANOVÝ KOMPLEX BAREVNÝCH ODRUD BRAMBOR

M. ŠULC

*Česká zemědělská univerzita Praha, Fakulta agrobiologie, potravinových a přírodních zdrojů, Katedra chemie*

Korešpondenčný autor: *sulcm@af.czu.cz*

### DIELECTRIC PROPERTIES OF SELECTED LAYERED SILICATES DETERMINED BY TERAHERTZ TIME-DOMAIN SPECTROSCOPY

M. JANEK<sup>1</sup>, I. BUGÁR<sup>2</sup>, D. LORENC<sup>2</sup>, V. SZÖCS<sup>3</sup>, D. VELIČ<sup>3</sup>, D. CHORVÁT<sup>4</sup>

<sup>1</sup>*Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava*

<sup>2</sup>*Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, Bratislava*

<sup>3</sup>*Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Bratislava*

<sup>4</sup>*Ústav polymérov, Slovenská Akadémia Vied, Dúbravská cesta, SK-84236 Bratislava, Slovenská republika*

Korešpondenčný autor: *janeck@fns.uniba.sk*

The method of time-domain terahertz spectroscopy (TDS) was used to determine the optical properties of layered silicates in the far-infrared region. The terahertz electromagnetic spectrum is situated between far-infrared and microwave radiation. Characteristic rotational, vibrational or thermal emission lines can be determined; moreover these include also the transitions from vibrational to translational motion of mobile ions in the structure of the solids. The main advance of the TDS is coherent measurement of transmitted electric field (Figure 1) providing high sensitivity and resolving phase information [1]. Absorption properties of highly charged layered silicates belonging to the smectite group were investigated by TDS in the region of 0.3 to about 1.5 THz corresponding to 10 and 50  $\text{cm}^{-1}$ , respectively. Investigated samples were selected so, that either the same type of the interlayer cation e.g. magnesium was presented in a hydrated state (vermiculite) or dehydrated state (phlogopite), or different dehydrated cationic species were compared, e.g. potassium (muscovite), in the gallery of the silicate framework. The complex index of refraction of these natural materials was determined in the above mentioned frequency region and the experimental data were accounted by a model concerning absorption in a disordered ionic crystals (Figure

2) [2, 3].

- [1] Ferguson B. and X.-Ch. Zhang (2002) *Nature Materials*, 1, 26-33.
- [2] Schlömann E. (1964) *Phys. Rev.*, 135, A413-A419.
- [3] Strom U. and Taylor P.C. (1977) *Phys. Rev. B*, 16, 5512-5522.

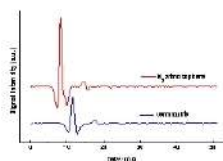


Figure 1. The pulses as determined in the time domain for nitrogen atmosphere and for vermiculite sample.

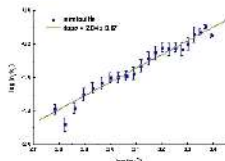


Figure 2. Dependence of product of the real refractive index and absorption index as function of frequency. The slope of theoretical line approximate value 2 expected for disordered ionic materials.

nM  $\text{Ca}^{2+}$ , frequencies similar to those observed experimentally were obtained with apparent RyR calcium sensitivity of  $10 \mu\text{M}$ , i.e., close to physiological, with allosteric coupling strength unmodified from the original model [2]. The model was in good accordance with published experimental data on calcium spark formation and wave propagation. We show that initiation and propagation of calcium waves is strongly dependent on the steepness of the calcium dependence of open probability at basal calcium levels. Thus, elevated spark frequency is not a necessary prerequisite for generation of arrhythmic calcium waves in cardiac myocytes.

*This research was supported by the European Union contract No. LSHM-CT-2005-018802/CONTICA, grants from Slovak agencies APVV 51-031104 and KEGA 3/3075/05, and by the ESF FUNCDYN Programme.*

- [1] Coombes S, Hinch R, Timofeeva Y. *Prog Biophys Mol Biol*. 85: 197-216, 2004.
- [2] Zahradnik I, Gyorke S, Zahradnikova A. *J Gen Physiol*. 126:515-27, 2005.

## Prednášky – sekcia 1

### CALCIUM SPARK FREQUENCY AND WAVE PROPAGATION IN A FIRE-DIFFUSE-FIRE MODEL OF CARDIAC MYOCYTE

I. VALENT<sup>1</sup>, I. ZAHRADNÍK<sup>2</sup>, A. ZAHRADNÍKOVÁ<sup>2</sup>

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

<sup>2</sup>Institute of Molecular Physiology and Genetics, Slovak Academy of Sciences, Vlárská 5, 833 34 Bratislava

Korešpondenčný autor: valent@fns.uniba.sk

Diastolic  $\text{Ca}^{2+}$  spark frequency, a key regulator of sarcoplasmic reticulum calcium content, is increased in the failing heart. This increase might contribute to the decrease of cardiac contractility as well as to the increase in the propensity to arrhythmias initiated by diastolic calcium release. An insight into these phenomena was provided by a stochastic fire-diffuse-fire (FDF) model [1] of calcium sparks and wave generation.

We have modified the FDF model by inclusion of release sites composed of clusters of RyR channels with steady-state open probability governed by a calcium-dependent mechanistic gating model. A  $\text{Ca}^{2+}$  spark was activated upon opening of at least one RyR in the cluster. The aEMG model [2], based on intra-monomeric allosteric coupling between calcium binding and channel opening was used for description of RyR gating.

The frequency of  $\text{Ca}^{2+}$  sparks predicted by this model depended steeply on basal calcium concentration. At 100

### HETERO-VIBRATIONAL INTERACTIONS, COOPERATIVE HYDROGEN BONDING AND VIBRATIONAL ENERGY RELAXATION

P. BODIŠ, W.J. BUMA, S. WOUTERSEN

University of Amsterdam, Van 't Hoff Institute for Molecular Sciences - HIMS Nieuwe Achtergracht 166 1018 WV Amsterdam

Korešpondenčný autor: bodis@amolf.nl

Femtosecond two-dimensional infrared (2D-IR) spectroscopy has been used to study the conformation of a rotaxane composed of a benzylic amide-based ring hydrogen-bonded to a succinamide-based thread. Both the ring and the thread contain carbonyl groups. The solution conformation of the ring-thread system has been probed by determining the coupling between the stretching modes of these groups from the cross peaks in the 2D-IR spectrum. From the shape of the diagonal peaks we conclude that the carbonyl stretching bands of the thread are inhomogeneously broadened. This indicates that in solution the rotaxane molecules exhibit significant conformational heterogeneity.

In addition we have investigated the interaction between the NH- and CO-stretch vibrations in a rotaxane. From the transient-absorption spectrum, we obtain the cross anharmonicities and cross-peak anisotropies arising from the  $\text{NH}_{\text{macrocycle}}/\text{CO}_{\text{macrocycle}}$  and  $\text{NH}_{\text{macrocycle}}/\text{CO}_{\text{thread}}$  interactions. The CO and NH groups that form the macrocycle-thread hydrogen bonds are found to interact much more strongly than the CO and NH groups in other molecular systems containing the same NH·

-OC hydrogen-bond motif. We attribute this enhancement of the NH/CO anharmonic interaction to a cooperative effect, by which the two ring-thread hydrogen-bonds sharing a hydrogen bond acceptor mutually amplify each other. The relaxation dynamics of the NH/CO cross peaks has also been investigated. Surprisingly, the NH/CO cross peak observed upon exciting the NH-stretch mode decays much more slowly than the corresponding diagonal NH-stretch peak. This can be explained by the presence of an intermediate state that becomes populated in the NH-stretch vibrational relaxation, and that is coupled to the CO-stretch mode. Our results demonstrate that 2D-IR spectroscopy can be used to observe structural changes in molecular devices on a subpicosecond time scale.

### POLYMERIC TRANSDUCERS RECENTLY USED IN BIOSENSING. ELECTROCHEMISTRY OF POLYMERIC FILMS

J. GALANDOVÁ<sup>1</sup>, R. OVADEKOVA<sup>1</sup>, G. ZIYATDINOVA<sup>2</sup>, J. LABUDA<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Slovenska Technická Univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav analytickej chémie

<sup>2</sup>Kazan State University, Kazan, A.M. Butlerov Institute of Chemistry, Analytical Chemistry Department

Korešpondenčný autor: [julia.galandova@stuba.sk](mailto:julia.galandova@stuba.sk)

This contribution refers about nanostructured polymers which are recently used for working electrode surface modification. Polymers doped with carbon nanotubes (CNT), nanofibres and other nano-scale components are today of great interest. We have used the polymer matrix for improved immobilization of DNA or for enhancement of electrochemical properties of layer on electrode surface via interaction with redox probes. We used in our experiment screen-printed electrode. The surface of this electrode was covered by using mixture of multi-walled carbon nanotubes and polymers: chitosan (CHIT) and polyethylenimine (PEI). In the case of polycationic CHIT the amino groups can electrostatically interact and thus can form a complex with the negatively charged phosphate backbone of DNA and in the case of PEI the scaffold formed by the branched PEI molecules sterically prevents a strong compaction of the DNA molecules. CHIT is a good disperse agent for CNT. CNT are sufficiently entrapped within the polymeric net of PEI. The electrochemical methods such as cyclic voltammetry, differential pulse and square wave voltammetry were used. Results obtained by electrochemical impedance spectroscopy correspond to voltammetric data. Here the electrode surface resistance values have shown the differences in properties of DNA layer on various nanostructured polymeric films. This sensor has shown utility for DNA damage investigation and also for DNA-interactions investigation.

The work was supported by the Research and Development Assistance Agency under the contract No. APVT-20-015904.

### MOŽNOSTI ATOMOVÉ SPEKTROSKOPIE PŘI STANOVENÍ Hg

J. SEIDLEROVÁ<sup>1</sup>, M. NOVÁČKOVÁ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vysoká škola báňská - Technická univerzita Ostrava

<sup>2</sup>VŠB - TUO

Korešpondenčný autor: [jana.seidlerova@vsb.cz](mailto:jana.seidlerova@vsb.cz)

Rtuť a její sloučeniny jsou vysoce toxické pro člověka a živé organismy. V životním prostředí je perzistentní a v posledních letech je znečištění rtuťmi chápáno jako celosvětový problém. Ve formě methylrtuť jako nejtoxičtější formě se shromažďuje a koncentruje zvláště ve vodách a z nich pak přechází do potravinového řetězce.

Nedílnou součástí sledování koloběhu Hg v životním prostředí jsou analytické metody jejího stanovení v různých maticích. Vedle elektrochemických analytických metod má v této oblasti nezastupitelné místo atomová spektroskopie - rentgenfluorescenční (využívaná především pro oleje a pevné vzorky), absorpční i emisní (využívaná pro vodné matrice i organické rozpouštědla, extrakty pevných vzorků).

Přednáška je zaměřena na srovnání a možnosti využití atomové absorpční spektroskopie (termooxidační metoda prezentována přístrojem AMA, metoda studených par AAS) a atomové emisní spektroskopie s indukčně vázaným plazmatem s použitím různých zmlžovacích systémů při stanovení Hg v kapalných vzorcích na bázi vodných roztoků.

Autoři děkují MŠMT za poskytnuté prostředky na řešení projektu GAČR číslo 106/07/1436, v rámci kterého práce vznikla.

### ELEKTROCHEMICKÁ SYNTÉZA 4-METHOXYBENZADLEHYDU. VLIV ZÁKLADNÍHO ELEKTROLYTU NA KINETIKU A SELEKTIVITU REAKCE

T. BYSTRONĚ<sup>1</sup>, K. BOUZEK<sup>2</sup>

<sup>1</sup>VŠCHT Praha, Ústav anorganické technologie

<sup>2</sup>Vysoká škola chemicko-technologická Praha

Korešpondenčný autor: [tomas.bystron@vscht.cz](mailto:tomas.bystron@vscht.cz)

4-Methoxybenzaldehyd (4-MBA) patří do skupiny substituovaných aromatických aldehydů, jež jsou významnými meziproducty při výrobě řady speciálních chemikálií, jako jsou léčiva, barviva či složky parfémů. Nejvýhodnějším způsobem produkce 4-MBA se dnes jeví proces založený na elektrochemické methoxy-laci 4-methylanisolu (4-MA). Anodická oxidace 4-

MA v prostredí methanolu vede v prvom stupni na 4-methoxybenzylmethyl ether (4-MBME). Ve druhom stupni vzniká 4-methoxybenzaldehyd dimethylacetal (4-MBA DMA) [1]. Následná kyselá hydrolyza 4-MBA DMA pak poskytuje požadovaný 4-MBA. Zmíněný proces je charakteristický vysokou selektivitou oxidace 4-MA na 4-MBA. Mezi jeho nesporné výhody patří rovněž možnost realizace kontinuálního uspořádání technologie.

Důležitým parametrem, který ovlivňuje průběh elektrochemického procesu je charakter základního elektrolytu. Ten byl rovněž tématem předkládané práce.

Kinetika methoxylačných reakcí byla studována v klasickém 3-elektrodovém uspořádání. Jako pracovní byla použita rotující disková elektroda z leštěného skelného uhlíku (GC). Rovněž vsádková elektrolyza byla prováděna v 3-elektrodovém uspořádání. Pracovní elektrodou byla destička z GC o rozměrech 5 x 5 cm<sup>2</sup>. Protielektrody byly vyrobeny z Pt fólie. Jako referenční elektroda sloužila nasycená kalomelová elektroda. Studovány byly methanolové roztoky NaClO<sub>4</sub> a KF. Kinetika jednotlivých reakcí byla vyhodnocena z pseudostacionárních polarizačních křivek a popsána pomocí Tafelovy a Arrheniovy rovnice.

Výsledky ukázaly, že NaClO<sub>4</sub> se chová jako indiferentní elektrolyt, zatímco KF je v oblasti potenciálů, při nichž probíhají methoxylačné reakce, elektrochemicky aktivní. Přítomnost KF v elektrolytu již v nízkých koncentracích významně ovlivňuje methoxylaci 4-MBME a 4-MBA DMA. Pro objasnění celkového vlivu základního elektrolytu na průběh elektrolyzy byly výsledky kinetických experimentů doplněny výsledky galvanostatických vsádkových elektrolyz. Složení vzorků odebraných v jejich průběhu bylo sledováno pomocí plynové chromatografie. Analýzy sloužily k určení selektivity elektrolyz vzhledem k 4-MBA a proudového výtěžku procesu v závislosti na aktuálním stupni konverze výchozí látky. Zmíněné parametry jsou diskutovány v souvislosti s výsledky kinetických měření.

*Práce je podporována z prostředků evropského projektu IMPULSE, č.p. NMP2-CT-2005-011816*

[1] H. Wendt, S. Bitterlich, *Electrochimica Acta* 1992, 37, 1951

## VYUŽITELNOST PORTLANDSKÝCH CEMENTOV PRE SYNTÉZY MDF MATERIÁLOV

M. DRÁBIK

*Ústav anorganickej chémie SAV, Bratislava*

Korešpondenčný autor: *uachmdra@savba.sk*

Sieťovanie vs. hydratácia v priebehu MDF syntéz: Jednou z podmienok úspešnosti uvedených syntéz je, aby sieťovanie bolo v kľúčových štádiách (1/2. - 3. hod) takmer výlučným procesom. Rýchlosti sieťovania teda nesmie konkurovať rýchlosti hydratácie. Toto je možné zabezpečiť zložením reakčnej zmesi, definovaním reakčných podmienok, ako aj návrhom optimálnej granulometrie cementu.

Cement sa spolu s úletom mieša v miešačke cca. 10 min, potom sa pridáva poly-P a piesok (ak je v navrhovanej kompozícii) a suchá zmes sa mieša ďalších 10 min. Po pridaní základnej dávky zámesovej vody -  $v/c = 0,15$  (plastifikátor alebo glycerín v príslušných množstvách sú rozmiešané vo vode) sa mieša ďalších 10-15 min. V priebehu tohto miešania je pridávané ďalšie množstvo vody do dosiahnutia „suchoformovateľnej“ konzistencie. Hranoly 4x4x16, resp. (2-4)x14x16 cm sa vyrábajú klasickým postupom - plnením do foriem postupným zhutňovaním vo vrstvách. Tlak je aplikovaný 30 min. bežným lisom. Hranoly sú ďalej ošetrované podľa zažívaných predpisov a noriem.

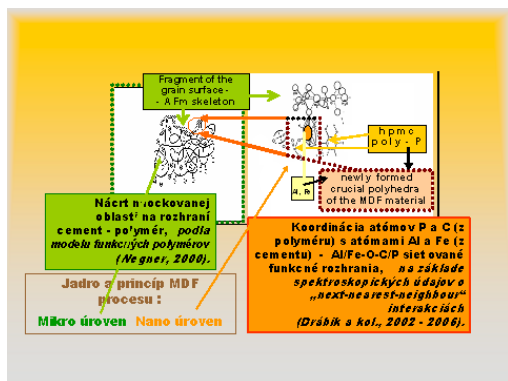
Obr.:

Aktuálne výsledky ukazujú, že k sieťovacej interakcii slinkových fáz s polyfosforečnanom dochádza v celom objeme vzorky. Uvedený proces bol pozorovaný na nano-aj mikro- úrovniach, avšak v sledovaných systémoch nebol výlučnou interakciou. Mimo sieťovaných zón prevažuje prítomnosť platničkových kryštálov portlanditu.

Testovaný MDF relevantný materiál vykazuje fyzikálno-mechanické parametre ako aj odolnosť vo vlhkom prostredí výrazne vyššie oproti hodnotám betónov daným triedami cementov. Budú však žiaduce ďalšie zlepšenia týchto parametrov, napr. popri použití strižného resp. twin-roll miešania aj úpravami surovinového zloženia, alebo ošetrovaním vzoriek po výrobe výlučne na vzduchu.

*Výskum sa uskutočňuje vďaka podpore a záujmu agentúry VEGA (projekt 5011) a Považskej cementárne Ladce a. s. (vedecko-technická spolupráca a expertíza).*

## Prednášky – sekcia 2



Model atomárných sietí a prenosu ich účinku cez mikroštruktúru na vývoj a úroveň pevností.

### MOŽNOSTI ZEFEKTÍVNEJŠIEHO VÝROBNÉHO PROCESU OLOVNATÉHO KRIŠTÁĽU

D. ONDRUŠOVÁ, G. RUDINSKÁ, M. PAJTÁŠOVÁ

Fakulta priemyselných technológií TnUAD, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov

Korešpondenčný autor: ondrusova@fpt.tnuni.sk

Hľadanie nových možností zefektívňovania výrobných procesov je prioritou každej súčasnej priemyselnej výroby. Práca pojednáva o možnostiach využitia druhotných zdrojov - energetického a surovinového, vznikajúcich v procese výroby olovnatého krištáľu. Energetickým zdrojom sú spaliny odchádzajúce z taviaceho procesu, ktorých druhotná tepelná energia môže byť využitá na predohrev sklárskej vsádzky. Bola skúmaná možnosť predohrevu s cieľom vylepšenia energetickej bilancie konkrétneho taviaceho procesu. Skúmaný surovinový zdroj predstavuje filtrový prach, pochádzajúci zo spalín, vznikajúcich pri tavení skla. Táto problematická odpadná surovina je kvôli vysokému obsahu PbO (cca 56 hm.%) klasifikovaný ako nebezpečný odpad. Bola študovaná možnosť recyklácie filtrového prachu s cieľom ekologizácie výroby olovnatého krištáľu s efektom finančnej úspory. U pripravených modifikovaných vzoriek olovnatého skla s prídavkom filtrového prachu boli skúmané optické vlastnosti (index lomu, svetelná priepustnosť, kolorita), hustota a chemická odolnosť.

Práca vznikla s podporou grantovej agentúry MŠ SR KEGA č. 3/3230/05 a VEGA č. 1/3161/06

### HYBRIDNÉ ANORGANICKO-ORGANICKÉ ZLÚČENINY KOBALTU A NIKLU NA BÁZE POLYVANADIČNANOV

L. ŽÚRKOVÁ<sup>1</sup>, E. RAKOVSKÝ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 84215 Bratislava 4

<sup>2</sup>Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Bratislava

Korešpondenčný autor: zurkova@fns.uniba.sk

Komplexy prechodných kovov viazané na polyvanadičnanový ión  $[V_xO_y]^{n-}$  vytvárajú, z hľadiska chemických a fyzikálnych vlastností, zaujímavú skupinu hybridných anorganicko-organických zlúčenín, ktorá reprezentuje relatívne nový typ koordinačných zlúčenín. Rôznorodosť vlastností týchto zlúčenín je daná veľkou variabilitou ich štruktúr, ktorú ovplyvňujú organické a komplexné častice [1]. Prítomné polyvanadičnanové ióny môžu mať rôznu nuklearitu a vytvárať cykly, reťazce alebo vrstvy [2].

Zo systémov  $KVO_3 - M^{II}(NO_3)_2 \cdot 6H_2O - na(dpy) - H_2O$  ( $M^{II} = Co$  a  $Ni$ ,  $na =$  nikotínamid,  $dpy = 4,4'$  dipyridín), boli pripravené štyri nové zlúčeniny, zloženia:  $[M^{II}_2(H_2O)_2(na)_2(VO_3)_4] \cdot H_2O$  (1 a 2),  $[M^{II}_2(dpy)_3(VO_3)_4] \cdot 6 H_2O$  (3 a 4). V štruktúrach (1 a 2) sa vyskytujú dva druhy, kryštalograficky neekvivalentných koordinačných polyédrov  $M^{II}N_2O_4$ . V jednom z nich je centrálny atóm viazaný na atómy N pyridínového kruhu a v druhom na atómy N karbamidovej skupiny. Nikotínamid je mostíkovým ligandom, ktorý spája dva centrálné atómy. V—O skelet je tvorený tetradami  $VO_4$  spojenými prostredníctvom vrcholov. Ďalšie vrcholy každého tetraedra sú prostredníctvom atómov kyslíka viazané na centrálny atóm, čím vzniká 3D sieť. V jednom z koordinačných polyédrov  $M^{II}$  pochádzajú dva atómy kyslíka z molekúl vody a dva z V—O skeletu a v druhom sú všetky štyri atómy kyslíka súčasťou V—O skeletu.

Termický rozklad pripravených zlúčenín prebieha v dvoch stupňoch. V prvom stupni, nad  $200^\circ C$ , dochádza k dehydratácii a redukcii  $V^V$  na  $V^{IV}$ . Druhý stupeň spojený s oxidáciou organických zlúčenín, začína pri teplotách nad  $350^\circ C$  a končí okolo  $500^\circ C$ . Pri ďalšom ohreve látok bol pozorovaný nárast hmotnosti, ktorý súvisí s oxidáciou  $V^{IV}$  na  $V^V$ . Tento jav bol pozorovaný aj pri ďalších hybridných anorganicko-organických polyvanadičnanoch [3]. Konečným produktom termického rozkladu všetkých štyroch zlúčenín sú príslušné metavanadičnany  $M^{II}(VO_3)_2$ .

Táto práca bola finančne podporovaná grantom MŠ SR, VEGA č. 1/4462/07.

- [1] P.I. Hargman, R.C. Finn, J. Zubieta, Solid State Sciences 3, 754 (2001).
- [2] D. Joniaková, R. Gyepes, E. Rakovský, P. Schwendt, L. Žúrková, J. Marek, Z. Mička, Polyhedron 25, 2491 (2006).
- [3] R. Kucsera, D. Joniaková, L. Žúrková, J. Therm. Anal. Calor. 78, 263 (2004).

## BIOLOGICKY AKTÍVNE KOORDINAČNÉ ZLÚČENINY ZINKU

K. GYORYOVA<sup>1</sup>, D. HUDECOVÁ<sup>2</sup>, J. KOVÁŘOVÁ<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Univerzita P.J.Šafárika v Košiciach, Prírodovedecká fakulta, Moyzesova 11, Košice

<sup>2</sup>FChPT STU, Ústav biochémie, výživy a ochrany zdravia, Oddelenie biochémie a mikrobiológie

<sup>3</sup>Ústav makromolekulární chemie, Akademie věd České republiky, Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6

Korešpondenčný autor: gyoryova@upjs.sk

Zinok je esenciálny prvok a je nevyhnutný pre zabezpečenie koordinácie medzi nervovým, neuroendokrinným a imunitným systémom. Úloha zinku ako štrukturálneho prvku vyplýva z jeho schopnosti viazať sa na cysteín a histidín a tak vytvárať nové konformačné štruktúry známe ako „zinkové prsty“ so špecifickými biologickými vlastnosťami. Zinok je tak nepostrádateľnou súčasťou superoxidodismutázy, ktorá zachytáva voľné radikály. Keďže sa zúčastňuje na mnohých biologických procesoch, sú jeho komplexné zlúčeniny známe svojím využitím v oblasti farmakológie a medicíny. Napr.: Zn-etylén-bis-tiokarbamid (Mancozeb) vykazuje fungicídne vlastnosti a nachádza uplatnenie pri ochrane dreva. Pikolinát zinočnatý  $Zn(pic)_2$  je účinný na herpes simplex vírus. Niektoré makrocyclické chelátové zlúčeniny zinku slúžia ako lipofilné nosiče pre anti HIV lieky.

Pripravili sme nové koordinačné zlúčeniny zinku na báze arylkarboxylových kyselín a ich substitučných derivátov (kyselina benzoová, a jej halogén- a hydroxyderiváty) s molekulovými organickými neutrálnymi ligandami (papaverin, fenazon, kofeín, teobromín, nikotínamid a pod.). Študovali sme ich spektrálne a termické vlastnosti. Vyriešila sa kryštalová štruktúra u niektorých zlúčenín a stanovila sa ich antimikrobiálna aktivita.

Zo získaných spektrálnych a štruktúrnych údajov sme určili koreláciu medzi infračervenými spektrami a vyriešenou štruktúrou karboxylátov zinku. Pri štúdiu antimikrobiálnej účinnosti sa ukázalo, že komplexy  $[Zn_3(benz)_6(nia)_2]$  a  $[Zn(benz)_2(3 - pymeth)_2]_n$  sú najúčinnějšíe. Pri štúdiu ďalších komplexov sme zistili, že tieto vykazujú antimikrobiálnu aktivitu na  $G^-$  patogénne baktérie *Escherichia coli* a *Samonela düsseldorf* a voči  $G^+$  patogénnym baktériám *Staphylococcus aureus*. Na druhej strane neinhibujú rast probiotických  $G^+$  baktérii *Lactobacillus paracasei* a preto sú vhodné ako potenciálne zložky probiotík.

Za finančnú podporu ďakujeme grantovej agentúre MŠ SR VEGA č. 1/2474/05.

[1] Szunyogová E., Györyová K., Hudecová D., Píknová L., Chomič J. : J.Therm.Anal.Cal. 88(2007)1, 219-223.

[2] Marosová J., Findoráková L., Györyová K., Koman M., Melník M. : Acta Cryst. E63(2007)m1406-

m1407.

[3] V.Zeleňák, K.Györyová, D.Mlynárčík : Metal Based Drugs 8(2002)269.

## KOMPLEXNÉ ZLÚČENINY ŽELEZA S DERIVÁTMI PYRIDÍNU

I. ONDREJKOVIČOVÁ, S. GALKOVÁ

Oddelenie anorganickej chémie, Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov, FCHPT STU, Bratislava

Korešpondenčný autor: iveta.ondrejkoovicova@stuba.sk

Železo je esenciálny prvok pre živé organizmy a je nepostrádateľné pre rozmanité bunkové funkcie. Železo sa nachádza v aktívnych centrách metaloproteínov, zúčastňuje sa mnohých redoxných reakcií a vitálnych enzymatických reakcií. V živých organizmoch sa tiež nachádza veľký počet biologicky aktívnych derivátov pyridínu, ktoré môžu interagovať so zlúčeninami železa. Tieto skutočnosti podnietili záujem o štúdium prípravy a vlastností komplexov železa s významnými molekulovými N-donorovými ligandmi ako sú deriváty pyridínu. Z doterajších výsledkov vyplýva že, centrálny atóm železa spolu s veľkou variáciou ligandov javia veľkú rozmanitosť koordinačných polyédrov.

V našej práci sme sa sústredili na prípravu a štúdium vlastností nových komplexov železa s niektorými derivátmi pyridínu (L), ako sú nikotínamid (nia), N,N'-dietylnikotínamid (dena), ronikol (ron), 2-pyridylmetanol (pm) a metyl-3-pyridylkarbamát (mpk), z ktorých prvé tri sú preukazateľne biologicky aktívne. Pripravili sme 8 komplexných zlúčenín železa: 5 izotiokyanátokomplexov zloženia  $[Fe(NCS)_3(nia)_3]$  (I),  $[Fe(NCS)_3(pm)_3].2H_2O$  (II),  $[Fe(NCS)_3(mpk)_3]$  (III),  $[Fe(NCS)_2(dena)_2]_n$  (IV) a  $[ronH.ron][Fe(NCS)_4(ron)_2]$  (V) a tri zlúčeniny s inými aniónoligandmi zloženia  $[FeCl_3(pm)(H_2O)_2]$  (VI),  $[FeBr_3(mpk)(H_2O)_2]$  (VII) a  $[Fe(NO_3)_3(nia)_3].6H_2O$  (VIII). Tieto zlúčeniny boli charakterizované predovšetkým elementárnou analýzou, infračervenou spektroskopiou a komplexy IV a V, ktoré tvoria kryštály, aj röntgenovou štruktúrnou analýzou.

Zo štúdiá infračervených spektier pripravených komplexov (I-VIII) vyplýva, že pre izotiokyanátokomplexy (I-V) je veľmi dôležitou oblasť  $1800-2290\text{ cm}^{-1}$ , kde sa nachádzajú charakteristické pásy pre koordinovanú izotiokyanatanovú skupinu. V oblasti  $1750-1400\text{ cm}^{-1}$  sa nachádzajú charakteristické pásy pre príslušný koordinovaný ligand (L) v pripravených komplexoch. Predpokladáme, že tieto ligandy sú viazané na atóm železa atómom dusíka pyridínového kruhu, pretože vlnočer valenčnej vibrácie  $\nu(C=N)$  pyridínového kruhu sa posúva k vyšším hodnotám pre vzniknutú dipolaritu väzby  $C=N^+$  v heterocyklickom kruhu.

Autori ďakujú za finančnú podporu grantovej agentúre MŠ SR VEGA



1/2452/05 a 1/4454/07.

## VLIV STRUKTURNÍCH CHARAKTERISTIK ANODY NA ELEKTROCHEMICKOU SYNTÉZU ŽELEZANŮ

K. BOUZEK<sup>1</sup>, Z. MÁCOVÁ<sup>2</sup><sup>1</sup>Vysoká škola chemicko-technologická Praha<sup>2</sup>Ústav anorganické technologie, Fakulta chemické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická Praha

Korešpondenční autor: bouzek@vscht.cz

Anodické rozpouštění železné elektrody v silně alkalickém prostředí vede ke vzniku sloučenin železa v oxidačním stavu (+VI). Tyto látky, železany ( $\text{FeO}_4^{2-}$ ), mají velmi silné oxidační vlastnosti a našly tak uplatnění např. v technologii čištění odpadních vod či při konstrukci tzv. vysokokapacitních baterií.

Během ustálené anodické polarizace železa však dochází k deaktivaci povrchu elektrody. Za její příčinu je považována postupná přeměna složení vrstvy pokrývající povrch anody z  $\text{FeOOH}$  na  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ . Deaktivaci povrchu lze snížit výběrem vhodného materiálu anody [1,2]. Z tohoto hlediska představuje nejvýznamnější faktor obsah Si [1] či  $\text{Fe}_3\text{C}$  [2] ve slitině anody. Přednostní rozpouštění těchto fází vede ke kontinuální aktivaci povrchu železa vzhledem k anodickému rozpouštění.

Předmětem předkládané práce je porovnání bílé litiny (tj. materiálu bohatého na  $\text{Fe}_3\text{C}$ ) a křemíkaté oceli s čistým železem vzhledem k rychlosti kinetiky a mechanismu rozpouštění. K dosažení tohoto cíle byla použita cyklická voltametrie a elektrochemická impedanční spektroskopie (EIS). Získané výsledky byly ověřeny vsádkovou elektrolýzou. Studie byla dále rozšířena o porovnání sledovaných parametrů pro roztoky 14 M NaOH a 14 M KOH v rozmezí teplot 20 - 60 °C.

Z výsledků vyplynulo, že vlastní rozpouštění anody probíhá nejintenzivněji při použití bílé litiny ve 14 M NaOH. Rychlost rozpouštění roste s teplotou. Syntéza železanu je na druhou stranu neúčinnější ve 14 M KOH při použití těžké anody a při teplotě 60 °C. Železan v tomto případě totiž vzniká přímo v pevné formě a nepodléhá rychlému rozkladu. Anoda vyrobená z křemíkaté oceli vykazovala srovnatelné výsledky s bílou litinou pouze v 14 M NaOH při 20 °C.

Tato práce vznikla za podpory Grantové Agentury ČR projektu č. 104/05/0066.

[1] Lescuras-Darrou V., Lapicque F., Valentin G.: J. Appl. Electrochem. 32, 57 (2002).

[2] Bouzek K., Roušar I.: J. Appl. Electrochem. 27, 679 (1997).

## Prednášky – sekcia 2

### KRYSTALOCHEMICKÉ PROJEKTOVÁNÍ FÁZÍ S POŽADOVANÝMI VLASTNOSTMI

D. HAVLÍČEK<sup>1</sup>, O. KAMAN<sup>2</sup><sup>1</sup>Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze<sup>2</sup>Přírodovědecká fakulta University Karlovy

Korešpondenční autor: havlicek@natur.cuni.cz

Vztah mezi strukturou a fyzikálními vlastnostmi krystalických látek je intenzivně studován po mnoho let. Získané výsledky jsou vesměs uspokojivé a dnes obvykle dokážeme vysvětlit, jaké strukturální zvláštnosti jsou zodpovědné za výskyt sledované fyzikální vlastnosti. Mnohem komplikovanější však je cílená příprava krystalických materiálů, které budou danou fyzikální vlastnost vykazovat. V přednášce jsou podrobněji rozebrány způsoby cílené přípravy krystalů s významnými dielektrickými vlastnostmi a krystalů vykazujících protonovou vodivost. Obě skupiny látek jsou si chemicky podobné, jedná se o hydrogensoli anorganických kyselin s organickými dusíkatými kationty. V obou případech vede k výskytu zmíněných vlastností přeuspořádání protonů v krátkých vodíkových vazbách a proto je v přednášce věnovaná nemalá část právě vodíkové vazbě. V závěru je pak prezentována úspěšně realizovaná cílená příprava protonového vodiče na bázi kyselých fosforečnanů 1,4-diazabicyklooktanu.

### PŘÍPRAVA A VYUŽITÍ NANOČÁSTIC STŘÍBRA

L. KVÍTEK<sup>1</sup>, A. PANÁČEK<sup>2</sup>, R. PRUCEK<sup>2</sup>, J. SOUKUPOVÁ<sup>2</sup>, R. ZBOŘIL<sup>2</sup><sup>1</sup>Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta<sup>2</sup>Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta, Katedra fyzikální chemie

Korešpondenční autor: libor.kvitek@upol.cz

Nanočástice stříbra jako jeden z prvních produktů rodících se nanotechnologií pronikly v současnosti do běžného života člověka, kde se uplatňují zejména díky jejich antibakteriálním vlastnostem. Počátky jejich využití v praxi jsou však spojeny s jiným fenoménem - s povrchem zesílenou Ramanovou spektroskopií (SERS), která se stala jednou ze dvou spektroskopických metod umožňujících studium vysoce zředěných soustav. Jak antibakteriální aplikace, tak i SERS vyžadují nanočástice stříbra definovaných vlastností, stabilní ve vodných disperzních, kde je jejich hlavní aplikační oblast. Hlavní cestu jejich přípravy proto představují metody založené na chemické redukci rozpustné stříbrné soli. Přes neustálý rozvoj v této oblasti neexistuje dodnes jednoduchá univerzální metoda přípravy nanočástic



stříbra s definovanou velikostí a její úzkou distribucí. Řízení velikosti se odehrává buď ve dvoustupňovém procesu zvětšování primárních částic, případně lze využít vhodnou změnu reakčních podmínek, spojenou s tvorbou rozpustného komplexu [1] či přidávek látek modifikujících stav povrchu a tedy i rychlost růstu částic stříbra [2]. Tyto látky mnohdy nemodifikují pouze velikost částic, ale i jejich morfologii, ale i další vlastnosti, jako je elektrický náboj částic či jejich biologická aktivita. V poslední době se směřuje zájem o stříbrné nanočástice do oblasti konstrukce vysoce citlivých senzorů, založených na existenci tzv. povrchového plasmonu. Tento jev je spojen se silnou absorpcí světla okolo 400 nm, přičemž poloha maxima je vysoce citlivá nejen na změnu velikosti nanočástic, ale i na změnu dielektrických vlastností jejich bezprostředního okolí [3]. Takto lze specificky a s citlivostí v oblasti nanomol detekovat adsorbované molekuly na povrchu nanočástic stříbra i ve velmi komplikovaných analytech.

Autoři děkují za finanční podporu MŠMT ČR, granty 1M6198959201 a MSM 6198959218.

- [1] Kvitěk L., Prucek R., Panacek A., Novotny R., Hrbac J., Zboril R., *J. Mater. Chem.*, 15, 1099-1105, (2005)
- [2] Velikov K. P., Zegers G. E., van Blaaderen A., *Langmuir*, 19, 1384-1389, (2003)
- [3] Sherry L. J., Jin R., Mirkin C. A., Schatz G. C., Van Duyne R. P., *Nano Letters*, 6, 2060-2065, (2006)

## FOTOFYZIKÁLNÍ A BAKTERICIDNÍ VLASTNOSTI NANOTKANIN DOPOVANÝCH FOTODYNAMICKÝMI SENSITIZERY

J. MOSINGER<sup>1</sup>, K. LANG<sup>2</sup>, P. KUBÁT<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze

<sup>2</sup>Ústav anorganické chemie, v.v.i., AVČR, Řež

<sup>3</sup>Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., Dolejškova 3, 182 23 Praha 8

Korešpondenční autor: mosinger@natur.cuni.cz

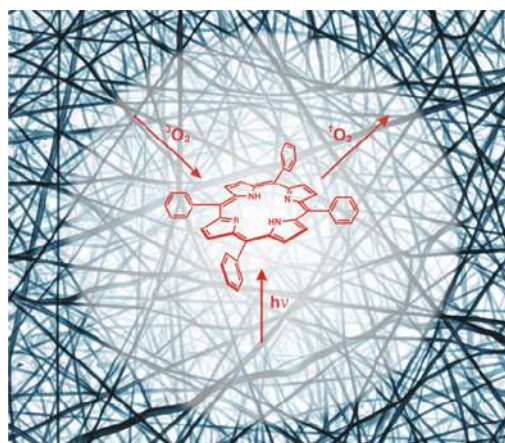
Metodou „electrospinning“ byla připraveny fotoaktivní nanotkaniny tvořené polymerními nanovláčky s enkapsulovanými fotodynamickými senzitizerem. Sensitizerem dopované nanotkaniny jsou efektivními producenty krátkověžijícího, vysoce oxidativního, cytotoxického singletového kyslíku (<sup>1</sup>O<sub>2</sub>) během ozařování viditelným světlem. Nanotkaniny byly charakterizovány pomocí EPR, UV-VIS, fluorescenční a časově rozlišenou spektroskopii. Analýzou dob života tripletových stavů senzitizerů ( $\tau_T$ ) a fotogenerovaného <sup>1</sup>O<sub>2</sub> ( $\tau_\Delta$ ) bylo zjištěno, že okolí nanovláček nemá vliv na  $\tau_T$  enkapsulovaného

sensitizeru. Doby života tripletových stavů senzitizeru jsou řízeny polymerem nanovláček. V přítomnosti kyslíku a jeho snadné difúzi polymerem jsou tripletové stavy zhášeny kyslíkem. Doby života  $\tau_\Delta$  jsou okolím nanovláček silně ovlivněny, což vypovídá o schopnosti <sup>1</sup>O<sub>2</sub> difundovat do okolí nanovláček. Nalezena byla též tzv. zpožděná fluorescence senzitizeru závislá na koncentraci <sup>3</sup>O<sub>2</sub>, kdy dochází k repulaci singletových stavů senzitizeru interakcí jeho tripletových stavů s <sup>1</sup>O<sub>2</sub>. Zpožděná fluorescence je možno použít jako kyslíkového senzitoru. Schopnost dopované nanotkaniny fotogenerovat <sup>1</sup>O<sub>2</sub> byla potvrzena fotooxidací anorganických a organických substrátů. Baktericidní efekt nanotkanin byl prokázán na bakteriálním kmenu *Escherichia coli* DH5 a ukázal autodesinfikující účinek na povrchu nanotkaniny ozařované umělým nebo denním světlem.

Nanotkaniny produkující <sup>1</sup>O<sub>2</sub> mohou mít řadu praktických aplikací. Lze je využít k syntéze produktů reakce <sup>1</sup>O<sub>2</sub>s příslušným substrátem, s možností snadné separace produktů reakce od vázaného senzitizeru. Nanotkaniny jsou vzhledem k malé velikosti pórů mezi nanovláčky schopné zachytávat bakterie a větší viry. Nanotkaniny dopované senzitizerem představují nové autodezinfikující, sterilní, krycí materiály např. pro medicínské aplikace, neboť kombinují vlastnosti cytotoxického <sup>1</sup>O<sub>2</sub> s velmi krátkým dosahem působení a průsvitných nanotkanin s velkým měrným povrchem, dobrou permeabilitou pro O<sub>2</sub> a bakteriálním záchytem [1].

Práce vznikla za finanční podpory grantů GAČR 203/07/1424 a 203/06/1244

- [1] Mosinger J., Jirsák O., Kubát P., Lang K., Mosinger B., Jr.: *J. Mater.Chem.*17: 164 (2007).



Schématické znázornění fotogenerace singletového kyslíku na nanovláčkách s enkapsulovaným senzitizerem

## SOLI DUSÍKATÝCH BAZÍ S DELOKALIZOVANÝMI ELEKTRONAMI - NOVÉ MATERIÁLY PRO NELINEÁRNÍ OPTIKU

I. NĚMEC<sup>1</sup>, I. MATULKOVÁ<sup>1</sup>, I. CÍSAŘOVÁ<sup>1</sup>, R. GYEPES<sup>2</sup>,  
M. FRIDRICHOVÁ<sup>1</sup>, L. KODRLOVÁ<sup>1</sup>, P. NĚMEC<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra anorganické chemie

<sup>2</sup>Karlova Univerzita v Praze, Přírodovědecká fakulta

<sup>3</sup>Univerzita Karlova v Praze, Matematicko-fyzikální fakulta, Katedra chemické fyziky a optiky

Korešpondenční autor: [agnemec@natur.cuni.cz](mailto:agnemec@natur.cuni.cz)

Polarizovatelné organické molekuly jsou v současnosti považovány za velmi perspektivní v oblasti materiálového výzkumu zaměřeného na přípravu nových materiálů pro nelineární optiku. Tyto molekuly jsou zajímavé nejen díky řadě velmi výhodných fyzikálních vlastností, ale také díky možnosti molekulového designu. Základním problémem těchto molekul je však jejich tendence ke tvorbě centrosymetrických dimérů, které pak nemohou vykazovat technicky využitelné vlastnosti jako je například generování druhé harmonické frekvence (SHG).

Cílem materiálového výzkumu v této oblasti je tedy příprava necentrosymetrických krystalických fází založených na vybraných organických molekulách. Jedním z nejefektivnějších používaných krystalochemických nástrojů je využití vodíkových vazeb, které zásadně ovlivňují orientaci polarizovatelných organických kationtů a mohou zabránit nevhodnému centrosymetrickému uspořádání v krystalové struktuře. Tato strategie dala vzniknout celé větvi nelineárních optických materiálů založených na vodíkovými vazbami zasíťovaných solích diskutovaných perspektivních organických molekul. V těchto sloučeninách jsou organické kationty nositeli požadovaných nelineárních vlastností a anionty (případně jejich sítě) přispívají především ke strukturní a teplotní stabilitě získaných krystalů.

V předkládaném příspěvku jsou prezentovány a diskutovány výsledky přípravy a charakterizace nových materiálů pro nelineární optiku založených na solích dusíkatých organických kationtů s delokalizovanými elektrony. Konkrétně se jedná o soli vznikající z aromatických (amino-deriváty triazolů a pyrimidinu) i acyklických (deriváty guanidinu a biguanidu) dusíkatých bazí při reakci s anorganickými nebo organickými kyselinami. Kromě výsledků rgt. strukturní analýzy je značná pozornost v příspěvku věnována interpretaci vibračních spekter s využitím kvantově-chemických výpočtů a v neposlední řadě studiu účinnosti generování druhé harmonické frekvence připravených materiálů.

Prezentovaná práce je součástí výzkumného záměru MSM002160857 financovaného Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy České republiky.

## DEPOZICE TENKÝCH VRSTEV INKJETOVOU TECHNIKOU

P. DZIK<sup>1</sup>, M. VESELÝ<sup>1</sup>, J. CHOMOUCKÁ<sup>1</sup>, L. RÁBOVÁ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>VUT v Brně, Fakulta chemická, Ústav fyzikální a spotřební chemie

<sup>2</sup>VUT v Brně, Fakulta chemická

Korešpondenční autor: [petr@dzik.cz](mailto:petr@dzik.cz)

Z plejády známých metod pro přípravu tenkých vrstev zaujímají specifickou pozici technologie vycházející z kapalných prekurzorů. Zde se nejčastěji uplatňují dva dnes již klasické způsoby jejich přípravy - tzv. *spi-coating* (rotační lití) a *dip-coating* (vytahování z roztoku).

Při *spin-coatingu* se kapalným prekurzorem budoucí vrstvy nanese na rotující substrát a vzájemné působení odstředivé síly, viskozity a rychlosti odpařování rozpouštědla zformuje budoucí tenkou vrstvu. V případě *dip-coatingu* se substrát vytahuje konstantní rychlostí z kapalného prekurzoru a výslednou vrstvu formují rychlost vytahování, odpařování a viskozita prekurzoru. Obě metody se těší velké oblibě, přestože u obou můžeme najít významná omezení. U *spin coatingu* je to zejména omezená velikost ovrstvovaných substrátů, u *dip-coatingu* obousměrné nanášení a vysoká spotřeba prekurzoru.

Zajímavým řešením výše nastíněných problémů je použití inkjetové tiskárny k nanášení kapalného prekurzoru budoucí vrstvy. Na tiskárnu je možné nahlížet jako na *de-facto* precizní zařízení umožňující přesně dávkovat a umístit ovšem nejen inkoust, ale v podstatě libovolnou kapalinu na plochu substrátu. Nutným požadavkem na tiskárnu je použití robustních piezoelektrických hlav a schopnost manipulovat s tuhými tiskovými médii.

Naše přednáška představí praktické zkušenosti s využitím tiskáren Epson pro tento úkol. Představíme konkrétní technické řešení, úpravy provedené na tiskárně i zkušenosti z dlouhodobého provozu. Následně pak ukážeme, jak parametry vlastní tiskového procesu (rozlišení, plošné krytí, rychlost tisku...) ovlivňují morfologii výsledné tenké vrstvy. Vše bude ilustrováno na konkrétním příkladu depozice tenkých vrstev oxidu titaničitého z organických prekurzorů.

## Prednášky – sekcia 3

### POLYMERS ON THE 2-OXAZOLINE BASIS CONTAINING BIPHENYL STRUCTURE

J. LUSTOŇ, J. KRONEK, I. JANIGOVÁ

Ústav polymérov, Slovenská Akadémia Vied, Dúbravská cesta, SK-84236 Bratislava, Slovenská republika

Korešpondenční autor: [upollust@savba.sk](mailto:upollust@savba.sk)

Cyclic iminoethers, mainly 2-oxazolines are versatile

compounds with a broad utilization in organic and polymer chemistry [1]. 2-Oxazolines react with carboxylic acids, phenols and thiols [2]. They took parts in ring opening cationic polymerization and polyaddition reactions [2]. It is noteworthy that they behave as bifunctional group in cationic polymerization and as monofunctional moieties in addition reactions.

As concern polyaddition reactions, 2-oxazolines take part in AA+BB as well as in AB type polyreactions. In this part of our studies on synthesis and polymerization of 2-oxazolines, we attempted to prepare polymers containing a mesogen group in the molecule. The biphenyl unit [3] was chosen as a mesogen. Two different compounds, 4-hydroxy-4'-(2-oxazolin-2-yl)biphenyl (**1**) and 4,4'-bis(2-oxazolin-2-yl)biphenyl (**2**), were prepared as monomers of AB and AA type for polyaddition reactions.

The monomer **1** was polymerized under the conditions of addition polyreaction in melt as well as in solution. Polymers of the poly(ether amide) structure were obtained.

The monomer **2** was also polymerized under the conditions of addition polyreaction with a series of aliphatic linear dicarboxylic acids. Polymers with the poly(amide ester) structure were obtained. Thermal properties of these polymers were compared.

*Authors gratefully appreciate the financial support of Slovak Grant Agency VEGA in the project No. 2/6117/26 and the Slovak research and development agency APVV in the project No. 003206.*

- [1] Kronek J., Lustoň J., Böhme F., Chem. Listy, 92, 475 (1998)
- [2] a) Culbertson B.M., Prog. Polym. Sci., 27, 579 (2002)  
b) Fry J., J. Org Chem., 15, 802, (1950)
- [3] a) Su W-F. A., J. Polym. Chem., 31, 3251 (1993)  
b) Mormann W., Bröcher M., Macromol. Chem. Phys., 197, 1841 (1996)

## PHOTOCHEMISTRY OF CONJUGATED PHEHOLS CONTAINING 2-OXAZOLINE RING

J. KRONEK, J. LUSTOŇ

Ústav polymérov, Slovenská Akadémia Vied, Dúbravská cesta, SK-84236 Bratislava, Slovenská republika

Korešpondenčný autor: juraj.kronek@savba.sk

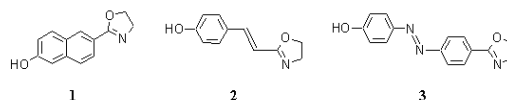
Compounds containing phenolic and 2-oxazoline groups represent a new group of monomers of AB<sub>x</sub> type in polyaddition reactions [1]. Beside the mentioned polymerization, these compounds are interesting also from the photochemical point of view. Phenolic group can react with a base upon a strong change in the electronic structure and spectroscopic properties [2]. On the other hand,

2-oxazoline ring is a weak base and electron-withdrawing group. Therefore, it can take part in proton and charge transfer, where both groups in the same molecule connected via conjugated system. Our effort was focused on the reaction of phenolic group containing 2-oxazolines with an organic polymeric base and a strong inorganic base. All studied compounds exhibit strong bathochromic shift in both, absorption and emission, spectra. Such changes can be described by the tautomeric equilibrium of benzoid and chinoid structures.

The compounds containing unsaturated bond provide photoinitiated transformations, namely E/Z isomerizations and [2+2] cycloadditions [3]. It means that compounds **2** and **3** represent dual stimuli sensitive particles, which can be used in many applications, e.g. controlled delivery, sensors or as probes for the monitoring of the complex polymer and living systems.

*Authors gratefully appreciate the financial support of Slovak Grant Agency VEGA in the project No. 2/6117/26 and the Slovak research and development agency APVV in the project No. 003206*

- [1] J. Luston, J. Kronek, F. Boehme, J. Polym. Sci. Polym. Chem., A44, 343- 355 (2006)
- [2] J. Kronek, J. Luston, F. Boehme, Macromol. Symp., 187, 427-436 (2002)
- [3] J. Saltiel, D. F. Sears, D. H. Ko, K. M. Park, Organic photochemistry and photobiology, Ed. W. M. Horspool, P. S. Song, CRC Press, New York, 1995, pp. 3



## NOVÉ TERMORESPONSIVNÍ POLYMERY PRO KOMBINOVANOU LOKÁLNÍ CHEMORADIOTERAPII

M. HRUBÝ<sup>1</sup>, J. KUČKA<sup>2</sup>, J. KOZEMPEL<sup>2</sup>, O. LEBEDA<sup>2</sup>, Č. KOŇÁK<sup>1</sup>, K. ULBRICH<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústav makromolekulární chemie, Akademie věd České republiky, Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6

<sup>2</sup>Ústav jaderné fyziky, Akademie věd České republiky, 250 68 Řež u Prahy

Korešpondenčný autor: mhruby@centrum.cz

Jednou z perspektivních lékařských aplikací termoresponsivních polymerů může být radioterapie kloubních zánětů či maligních lézí. V takovém případě je terapeutikem termoresponsivní kopolymer s vázaným radionuklidem. Takový polymer je dobře rozpustný

ve vodě za laboratorní teploty a snadno injikovatelný do místa požadovaného účinku. Při teplotě těla dochází k rychlé fázové separaci, takže vyloučená tuhá fáze polymeru zůstává v místě aplikace. Včleněním vhodné monomerní jednotky do polymerního řetězce lze docílit řízené degradace polymeru [1], jejíž rychlost je možné přizpůsobit poločasem rozpadu radionuklidu. Pokud je touto degradací zároveň odštěpeno z polymeru cytostatické léčivo v jeho aktivní volné formě, může dojít k synergickému účinku chemoterapeutika s radioterapeutikem a tím i k výraznému zlepšení léčebného účinku. V této studii byl připraven a charakterizován nový termoresponsivní systém založený na kopolymeru *N*-isopropylmethakrylamidu, *N*-isopropylakrylamidu, *N*-methakryloyltyrosinamidu a derivátu 6-*O*-methakryloylgalaktosy s protinádorovým antibiotikem doxorubicinem vázaným *N*-glykosylaminovou hydrolyticky labilní vazbou. Do kopolymeru zavedená tyrosinamidová skupina umožňuje jeho značení radionuklidy jodu (např.  $^{131}\text{I}$ ). Složení kopolymeru bylo nastaveno poměrem monomerních jednotek tak, aby měl polymerní konjugát s doxorubicinem teplotu fázové separace pod teplotou lidského těla, ale nad laboratorní teplotou. Může tedy být injekčně aplikován v roztoku, ale po aplikaci se vysráží. Odštěpením doxorubicinu se zvýší teplota fázového přechodu a při 37 °C dojde k rozpuštění polymeru a případně i jeho vyloučení z organismu. Odštěpení doxorubicinu je jen málo závislé na pH ve fyziologicky relevantním rozmezí (5,0 - 7,4) a probíhá kinetikou reakce prvního řádu s poločasem 6 dní, který je výhodný pro kombinaci s většinou běžných terapeutických radionuklidů.

*Studie byla vypracována za finanční podpory Grantové agentury Akademie věd České republiky (grant č. A400480616) a programu výzkumných center Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (grant č. IM 4635608802).*

- [1] Hrubý, M., Kučka, J., Lebeda, O., Macková, H., Babič, M., Koňák, Č., Studenovský, M., Sikora, A., Kozempel, J., Ulbrich, K.: New bioerodable thermoresponsive polymers for possible radiotherapeutic applications. *J. Controlled Release* 119 (2007) 25-33.

## VEKTORY PRO GENOVOU TERAPII SMĚROVANÉ POMOCÍ SYNTETICKÝCH OLIGOPEPTIDŮ

M. PECHAR<sup>1</sup>, R. POLA<sup>1</sup>, K. ULBRICH<sup>1</sup>, R. CARLISLE<sup>2</sup>, L. SEYMOUR<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ústav makromolekulární chemie, Akademie věd České republiky, Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6

<sup>2</sup>Department of Clinical Pharmacology, University of Oxford, Radcliffe Infirmary, Woodstock Road

Korešpondenční autor: pechar@imc.cas.cz

Genová terapie pomocí virů představuje velmi atraktivní přístup pro léčbu nádorových onemocnění. Účinnost transgenní exprese při použití virových nosičů, tzv. vektorů, je o několik řádů vyšší než účinnost nevirálních vektorů. Navzdory tomu je klinické využití virů pro genovou terapii doposud velmi omezené zejména pro jejich nízkou selektivitu, určitou rizikovost, vysokou imunogenicitu a rychlé vylučování vektorů z organismu. Bylo prokázáno, že povrchová modifikace rekombinantních adenovirů pomocí syntetických hydrofilních polymerů na bázi poly(ethylenglykolu) (PEG)<sup>[1]</sup> či *N*-(2-hydroxypropyl)methakrylamidu (HPMA)<sup>[2]</sup> výrazně prodlouží dobu jejich cirkulace v krvi a zároveň zabrání nežádoucímu nespecifickému průniku do různých typů buněk. Modifikace viru multivalentním reaktivním polymerem navíc umožní navázání zcela specifického směřujícího ligandu, např. peptidu, který se váže k nádorovým receptorům.<sup>[3]</sup>

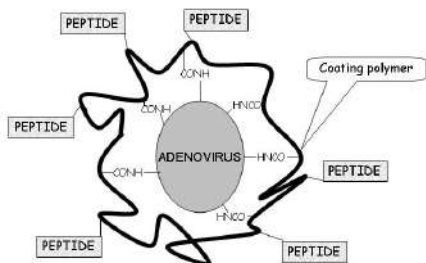
Připravili jsme genové vektory na bázi adenovirů kovalentně laterálně modifikované reaktivními HPMA kopolymery, nesoucími peptidové sekvence specifické pro vazbu na nádory prostaty. Peptidová sekvence *N*-acetyl-CTLVPHTRCGGGK vytvářená pomocí „phage display“ pro vazbu na PSMA (prostate-specific membrane antigen) receptor byla připravena syntézou na pevné fázi pomocí fluorenylmethoxykarbonyl/tert-butyl (Fmoc/t-Bu) strategie. Peptid byl intramolekulárně cyklizován přes cystinový můstek. Analogicky byla připravena „scrambled“ sekvence *N*-acetyl-CPRTLTHVCGGGK sloužící jako negativní kontrola. Peptidy byly navázány na kopolymer HPMA a *N*-methakryloyldiglycinu nesoucí reaktivní 4-nitrofenylesterové skupiny. Pouze část reaktivních skupin byla využita pro vazbu peptidů přes poly(ethylenglykolový) „spacer“, zbytek těchto skupin posloužil pro modifikaci povrchu adenovirů kódujících gen luciferázy. Míra exprese luciferázy sloužila pro kvantitativní porovnání účinnosti transgenní exprese směřovaných a nesměrovaných vektorů jak před, tak i po modifikaci polymerem.

Výsledky ukázaly, že polymerem modifikované adenoviry směřované pomocí syntetických oligopeptidů lze použít pro cílenou terapii nádorů prostaty.

*Práce vznikla za finanční podpory grantu EU GIANT č. 512087 a grantu Akademie věd České republiky č. KAN200200651.*

- [1] Y. Eto, J. Q. Gao, F. Sekiguchi, S. Kurachi, K. Katayama, M. Maeda, K. Kawasaki, H. Mizuguchi, T. Hayakawa, Y. Tsutsumi, T. Mayumi, S. Nakagawa, *J. Gene Med.* 2005, 7, 604.
- [2] N. K. Green, C. W. Herbert, S. J. Hale, A. B. Hale, V. Mautner, R. Harkins, T. Hermiston, K. Ulbrich, K. D. Fisher, L. W. Seymour, *Gene Ther.* 2004, 11, 1256.
- [3] A. L. Parker, K. D. Fisher, D. Oupický, M. L. Read,

S. A. Nicklin, A. H. Baker, L. W. Seymour, J. Drug Targeting 2005, 13, 39.



Adenovirus kovalentne modifikovaný multivalentným hydrofilným polymerom s peptidovými ligandami.

### PESTROST PEVNÝCH FARMACEUTICKÝCH SUBSTANCIÍ (POLYMORFY, HYDRÁTY, SOLVÁTY, AMORFÁTY, SOLI, KOKRYSTALY)

B. KRATOCHVÍL

Ústav chemie pevných látok, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze

Korešpondenčný autor: bohumil.kratochvil@vscht.cz

Pevné liekové formy (tablety) môžu obsahovať aktívnu substanciu (API) vo forme anhydrátu, hydrátu, amorfní formy, soli alebo kokryystalu. Navyč rada týchto foriem môže vykazovať polymorfizmus. Výber optimálnej API pre zvolenú liekovú formuláciu je určen aspektmi farmakokinetickými, biologickými, chemickými, fyzikálnymi, technologickými a v prípade generík veľmi výrazne i patentovými. V prezentácii sú probárané jednotlivé formy pevných API na príkladoch z literatúry a na základe vlastných výskumov, ktoré sú prováděny ve spolupráci s farmaceutickými firmami. U čistých polymorfů (anhydrátů, anhydrotů) je zmíněn obdivuhodný oktamorfizmus sloučeniny s triviálním názvem ROY (red-orange-yellow) a polymorfizmus námelového alkaloidu cabergolinu, který vytváří tři čisté polymorfy (anhydráty I, II a VII) a pět solvatomorfů (solvátů, VIII (*tert*-butylmethylether solvát 1:1), IX (toluen solvát 1:1), XV (cyklohexan solvát 1:1), XVI (*p*-xylen solvát 1:1), XVII (1,2,4-trimethyl - benzen solvát 1:1)). U námelového alkaloidu terguridu je ukázáno, jak lze obejít nepříjemný a bohatý solvatomorfizmus terguridové báze převedením na sůl - monomorfní tergurid hydrogen maleát monohydrát. Zajímavé je rovněž, jak lze dosáhnout stejného analgetického účinku při snížené dávce u kombinace propoxyfenu napsylátu monohydrátu (Darvocet) s acetaminofenem ve srovnání např. s čistým acetaminofenem. Nejrychleji se mezi pevnými formami

rozvíjí výzkum kokrystalů. Je zmíněna modifikace disolučního profilu kokrystalů fluoxetinu hydrochloridu s organickými kyselinami a struktura kokryystalu zolpidemu vinanu a zolpidemu báze.

Práce byla podpořena VZ MŠMT ČR pod číslem MSM 6046137302.

## Plenárne prednášky

### POLYMER DERIVED SILICON CARBIDE CERAMICS

P. ŠAJGALÍK, Z. LENČEŠ

Institute of Inorganic Chemistry SAS, Bratislava

Korešpondenčný autor: sasjgalik@savba.sk

Advanced ceramics as silicon nitride or silicon carbide are in principle composite polycrystalline materials. The main phases are usually crystalline grains of silicon nitride/ carbide and the secondary phases are amorphous phases distributed along grain boundaries. These are solidified liquid phases resulting from the sintering additives which are usually various oxides and very often oxides of lanthanides. These oxides form the liquid with the residual silica (main impurity of silicon nitride and carbide) at the temperatures of sintering. The properties of residual glassy grain boundary phases in a great extent dictate final room as well as high temperature behavior of such composites. Present paper deals with the new generation of the grain boundary phases, when, instead of silica rich phases are used silicon oxynitride phases in the polycrystalline ceramics. These are much more creep resistant at high temperatures and give a potential for the novel ultra high temperature materials with the application range up to 1 500 °C. Organometallic precursor CERASET® was used for preparation of the SiOC grain boundary phase. The new SiC/SiOC materials have hardness and fracture toughness similar to those prepared by addition of lanthanides but these ceramics are prepared at 450 °C lower temperature compared to "classical" SiC ceramics and their preliminary high temperature properties are very promising.

**60 ROKOV CHEMICKÝCH ZVESTÍ - CHEMICAL PAPERS**

K. BABOR

*Chemický ústav SAV*Korešpondenčný autor: *chemhirs@savba.sk*

Časopis s názvom Chemické Zvesti založil Spolok chemikov Slovákov v r. 1947. Pôvodne to bol spolkový časopis informujúci členov bez rozdielu stupňa odborného vzdelania o novinkách zo svetovej literatúry. Do roku 1951 vydával časopis SCHS vlastným nákladom, potom vtedajšia Slovenská akadémia vied a umení a od roku 1953 novozaložená Slovenská akadémia vied prostredníctvom Ústavu anorganickej chémie, neskôr Chemického ústavu.

Od roku 1969 všetky pôvodné vedecké práce vychádzajú vo svetových jazykoch, od roku 1989 výlučne v angličtine. Časopis od roku 1969 dostal podnadpis a od roku 1985 hlavný názov Chemical Papers.

V súčasnosti toto vedecké periodikum vydáva Chemický ústav SAV prostredníctvom poľskej agentúry Versita vo vydavateľstve Springer.

**Prednášky – sekcia 3****HYDROGENACE VYBRANÝCH OLEFÍNŮ ZASTOUPENÝCH V PYROLYZNÍM BENZÍNŮ**Z. SAZANOV<sup>1</sup>, V. TUKAČ<sup>1</sup>, V. CHYBA<sup>1</sup>, M. HANDLOVÁ<sup>1</sup>, J. HANIKA<sup>1</sup>, J. LEDERER<sup>2</sup>, J. KOLENA<sup>2</sup><sup>1</sup>*VŠCHT Praha*<sup>2</sup>*VÚANCH*Korešpondenčný autor: *sazanovz@vscht.cz*

Motivace: Pyrolyzní benzín obsahuje řadu olefinů a dienu s významným koncentračním zastoupením. Tyto látky jsou prekursory tvorby smol a je nutné je z reakční směsi odstranit. Při hydrogenaci pyrolyzního benzínu se velmi často používá katalyzátor typu egg-shell s aktivní složkou palladiem. Uložení aktivní složky do tenké povrchové slupky je do značné míry snížen vliv vnitřní difúze na rychlost reakce. Experimenty: Laboratorní experimenty byly provedeny v 500 ml autoklávu. Objem reakční směsi byl 250 ml o různém obsahu hydrogenované látky v toluenového roztoku, hydrogenace byly prováděny při teplotách 30-40°C a tlaku vodíku 2 a 5 bar. Byly studovány různé modelové směsi (styren - toluen, inden - p-xylene - toluen, atd.). Pro selektivní hydrogenace byl použit komerční (Noblyst 1505, Degussa) peletový katalyzátor typu egg-shell s obsahem 0.1 hmotnostního % palladia na  $\gamma$ -alumině o průměru částic 3 mm. Tento katalyzátor byl drcen a frakcionací byly získány částice

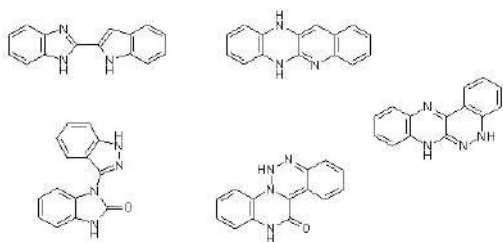
o průměru 0.024 mm, na kterých byly také provedeny pokusy. Při opakovaném použití katalyzátoru byla sledována jeho dezaktivace a její vliv na selektivitu reakcí. Vypracován byl také matematický model difúze uvnitř částic katalyzátoru, které byly získány drcením původního peletového katalyzátoru.

*Projekt byl řešen za podpory grantu MPO FT - TA/039, Ministerstva průmyslu a obchodu ČR a dílčího příspěvní grantu MSM 604 6137301, Ministerstva školství, mládeže a sportu ČR.*

**SYNTÉZY VÍCEJADERNÝCH NH KYSELIN A ŘEŠENÍ JEJICH STRUKTURY**I. FRYŠOVÁ<sup>1</sup>, J. SLOUKA<sup>2</sup>, A. LYČKA<sup>3</sup><sup>1</sup>*Katedra organické chemie, PřF UP v Olomouci, Tř. Svobody 8, 771 46 Olomouc*<sup>2</sup>*Univerzita Palackého Olomouc, Katedra organické chemie*<sup>3</sup>*Výzkumný ústav organických syntéz a.s. Pardubice*Korešpondenčný autor: *frysova@orgchem.upol.cz*

Současný výzkum v oblasti organické chemie je z velké části zaměřen na syntézu látek s potenciální biologickou aktivitou. Důraz je kladen především na účinnost kancerostatickou, neméně pak na účinnost virostatickou či bakteriostatickou. V pozadí nezůstávají ani snahy o nalezení účinných preparátů při nemocech kardiovaskulárního systému, nervové soustavy nebo poruchách metabolismu. Mezi sloučeniny interkalující se do dvojité šroubovice DNA patří především kondenzované aromatické systémy isocyklické a heterocyklické. Bylo zjištěno, že přírodní chinoxalinové sloučeniny, jako je echinomycin a triostiny jsou v tomto ohledu zvláště zajímavé, poněvadž působí jako bis-interkalátory. Z tohoto důvodu byl jeden ze směrů výzkumu na olomouckém pracovišti zaměřen i na deriváty chinoxalinu, avšak s ohledem na výzkum heterocyklických N-H kyselin disponovaných k interakcím s vazebnými centry prostřednictvím intermolekulárních vodíkových vazeb, byly vybrány deriváty chinoxalinu s kyselou N-H skupinou. Pozornost byla pak zaměřena na sloučeniny, které obsahují dvě tyto N-H skupiny a to buď v neměnné, předem stanovené vzdálenosti nebo v proměnných vzdálenostech daných konformací molekuly.

*Řešená problematika je součástí náplně grantu MSM6198959216.*



### FACTORS INFLUENCING THE C-ON BOND STRENGTH OF THE ALKOXYAMINES IN THE STYRENE-ACRYLONITRILE-TEMPO COPOLYMERIZATION SYSTEM

E. MEGIEL, A. KAIM

University of Warsaw, Faculty of Chemistry, Pasteura 1, 02-093 Warsaw, Poland

Korešpondenčný autor: emegiel@chem.uw.edu.pl

Homolytic Bond Dissociation Energy BDE of the (C-ON) bond for several N-alkoxyamines derived from 2,2,6,6-tetramethylpiperidine-1-oxyl (TEMPO) and the corresponding (C-H) bonds were determined from quantum-mechanical calculations including the B3LYP/6-31G(d), UB3LYP/6-311++G(2df,p), UB3LYP/6-311+G(3df,2p) and integrated IMOMO (G3:ROMP2/6-31G(d)) method. The investigated N-alkoxyamines were considered as models for dormant forms of propagating chains in the radical copolymerization process of styrene with acrylonitrile in the presence of TEMPO according to the terminal and penultimate model. The substituent effect on BDE was investigated. Radical Stabilization Energies (RSE) for radicals created from homolysis of the investigated N-alkoxyamines were calculated according to Rüchardt's method. Polar, steric and stabilization effects on C-ON alkoxyamine bond homolysis were studied. A dramatically weakened C-ON bond in the alkoxyamine containing two consecutive styrene units in the propagating chain was ascribed to several geometric parameters characterizing energetically unfavorable conformation of the substituents. These phenomena can be regarded as the penultimate effect in radical living/controlled copolymerization system of styrene with acrylonitrile.

[1] Hawker, C.J.; Bosman, A. W.; Harth, E. *Chem Rev* 2001, 101, 3661.

[2] Fischer, H.; *Chem Rev* 2001, 101, 3581.

[3] Feng, Y.; Liu, L.; Wang, J.-T.; Huang, H.; Guo, Q.-X. *J Chem Inf Comput Sci* 2003, 43, 2005.

### DIFFERENT BEHAVIOUR OF (ACRIDIN-9-YL)THIOSEMICARBAZIDES IN SYNTHESIS OF THE THIAZOLIDINONE HETEROCYCLES.

J. TOMAŠČIKOVÁ<sup>1</sup>, I. DANIHEL<sup>2</sup>, J. IMRICH<sup>2</sup>, P. KRISTIAN<sup>2</sup>, S. BÖHM<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Prírodovedecká fakulta UPJŠ, Ústav chemických vied, Katedra organickej chémie

<sup>2</sup>Department of Organic Chemistry, Institute of Chemistry, Faculty of Sciences, P. J. Šafárik University, Košice

<sup>3</sup>Department of Organic Chemistry, Institute of Chemical Technology, Prague

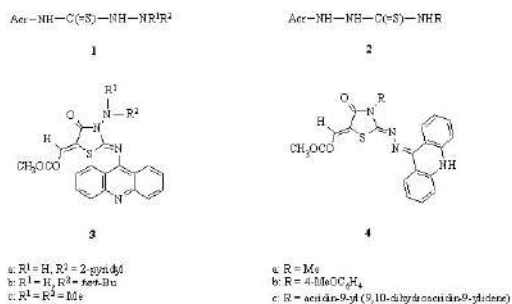
Korešpondenčný autor: tomascikova@gmail.com

Two types of (acridin-9-yl)thiosemicarbazides with an acridine moiety in the thiourea part **1** (Acr-NHCS) and hydrazine part **2** (Acr-NHNHCS) of molecule were prepared to investigate their reactions with dimethyl acetylenedicarboxylate (DMAD). Four nucleophilic centers within the thiosemicarbazide unit - three nitrogen atoms and one sulfur atom - give rise to the possibility of formation of several structural isomers. The sulfur atom of both precursors, **1** and **2**, attacked in the first step of the reaction the triple bond of DMAD to afford isothiosemicarbazide intermediates which cyclized consecutively *via* the N-2 nitrogen (**1**) or N-4 nitrogen (**2**) to give five-membered thiazolidinone derivatives **3** and **4**, respectively. Electronegative or bulky substituents of **1a**, **1b** prevented the cyclization *via* the N-1 nitrogen to a six-membered ring. Compounds **4** show an extensive planarity of the molecule due to a hydrazone system present. NMR, MS and IR spectra, X-ray analysis and DFT quantum chemical calculations were used to elucidate the structure of compounds under study. Some aspects of corresponding reaction mechanisms are discussed.

Financial support of this work by the Slovak Grant Agency (Grant No. 1/2471/05) and the NMR Program (Grant No. 2003SP200280203).

[1] Tomaščíková, J., Imrich, J., Danihel, I., Böhm, S. and Kristian, P., *Collect. Czech. Chem. Commun.* 72, 347 (2007).

[2] Tomaščíková, J., Danihel, I., Böhm, S., Imrich, J., Kristian, P., Potočník, I., Čejka, J. and Klika K. D., *J. Mol. Struct.* in press (2007).



Synthesized acridine derivatives

### PRODUKTY SULFONACE DIANHYDRIDU 3, 4, 9, 10-PERYLENTETRAKARBOXYLOVÉ KYSELINY OLEEM A MOŽNOSTI JEJICH PRŮMYŠLOVÉHO VYUŽITÍ

L. DUŠEK<sup>1</sup>, M. ČERNÝ<sup>2</sup>, L. BURGERT<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Pardubice

<sup>2</sup>Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Ústav polymerních materiálů, Oddělení vláknitých materiálů a textilní chemie

<sup>3</sup>Ústav polymerních materiálů, oddělení vláknitých materiálů a textilní chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice

Korešpondenčný autor: [libor.dusek@upce.cz](mailto:libor.dusek@upce.cz)

Při sulfonaci dianhydridu 3, 4, 9, 10-perylentetrakarboxylové kyseliny **1** kyselinou chlorosulfonovou nebo monohydrátem kyseliny sírové lze připravit produkty obsahující jednu  $\text{SO}_3\text{H}$ ,  $-\text{SO}_2-$  či  $-\text{O-SO}_2-$  skupinu. Zavedení druhé takovéto skupiny je již, vzhledem k nízké aktivitě substrátu k elektrofilní aromatické substituci, spojeno s použitím olea o vhodné koncentraci a teplot v rozmezí  $60\text{--}210^\circ\text{C}$ . Za těchto podmínek byly připraveny symetrické perylenové deriváty **1-6** jak je patrné z reakčního schématu 1.

Hydrolýzou sloučeniny **2** ve zředěném roztoku hydroxidu sodného a následným okyselením kyselinou chlorovodíkovou byla připravena 1,7-disulfoperylen-3, 4, 9, 10-tetrakarboxylová kyselina. Ta byla dále použita jako kyselé barvivo pro barvení vlny a polyamidu 6 při pH láně 3. Při 2 a 4 % vybarvení vykazovalo barvivo vysokou afinitu k vybarvovanému materiálu. Byly provedeny a vyhodnoceny základní stálosti - stálobarevnost v praní při  $60$  a  $90^\circ\text{C}$ , kyselý a alkalický pot a vyhodnocena stálobarevnost v umělém osvětlení (xenotest). V případě vlny byla též stanovena stálobarevnost v dekatuře horkou vodou (potting).

Sloučeniny **2**, **4** a **5**, respektive alkalickou hydrolýzou z nich připravené sodné soli příslušných perylentetrakarboxylových kyselin, byly dále testovány při vývoji technologie perylenového Pigmentu Red 149 jako moderátory růstu krystalů. Jejich účinek byl sledován pomocí SEM a byla měřena velikost a distribuce pigmentových částic.

Autoři si dovoluují poděkovat za finanční podporu Ministerstvu školství

(VZ 0021627501).

- [1] T. J. Solomeniev, V.I. Ragovik, T.A. Ibisova: Žur. Org. Chim. 22 (5),1050-1054, (1986).  
 [2] V.A. Žubanov, V.A. Solomin, V.V. Ljapynov: Žur. Org. Chim. 28 (7), 1486-1488, (1992).  
 [3] USXXCO US 2004215015A1 20041028 (2004), CAN141:386740.

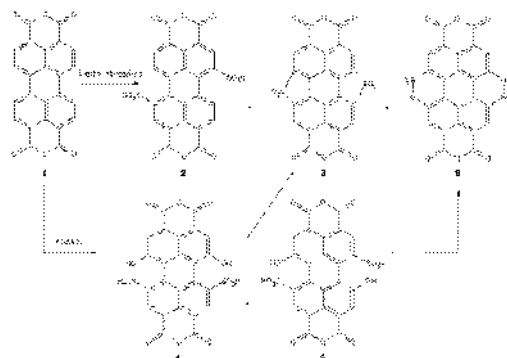


Schéma 1: Produkty sulfonace dianhydridu 3, 4, 9, 10-perylentetrakarboxylové kyseliny oleem za přítomnosti vzduchu

## Prednášky – sekcia 4

### VĚDA PRO STŘEDOŠKOLÁKY - PROJEKT BADATEL

M. KUBALA

Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci

Korešpondenčný autor: [mkubala@prfnw.upol.cz](mailto:mkubala@prfnw.upol.cz)

Na Přírodovědecké fakultě Univerzity Palackého v Olomouci se v loňském roce rozběhl projekt Badatel ([www.badatel.upol.cz](http://www.badatel.upol.cz)), který otevírá středoškolským studentům dveře univerzitních laboratoří a umožňuje jim vyzkoušet si, jak se dělá skutečná věda. Po zhruba roce trvání projektu můžeme říci, že se mezi studenty setkal s překvapivě velkým ohlasem, neboť v současné době registrujeme 59 středoškolských studentů, kteří se podílejí na řešení 29 projektů.

Většina studentů se přihlásí na projekt, který pracovníci naší fakulty vypsali do internetové databáze. Najdou se ovšem i studenti, kteří přijdou s vlastním zajímavým projektem a těm se potom snažíme najít odborného supervizora, který by jim s projektem pomohl. Ukazuje se, že středoškolaři jsou schopni ovládnout metodiky používané ve špičkovém výzkumu a díky své aktivitě a nadšení jsou schopni dosahovat velmi dobrých výsledků.



Přesvědčili jsme se o tom i na malé konferenci, kterou jsme pro studenty letos na jaře uspořádali. Prezentované příspěvky měly velmi vysokou úroveň a dá se říci, že téměř všechny by se daly obhájit jako práce bakalářské, ty nejlepší byly dokonce srovnatelné s diplomovými. Někteří studenti dokonce také uváděli, že jejich výsledky budou součástí odborné publikace.

Na základě dosavadních zkušeností se domníváme, že projekt je přínosný jak pro studenty, tak pro univerzitu a věříme, že se bude dále úspěšně rozvíjet.

*Chtěl bych poděkovat všem, kteří svým úsilím umožnili chod projektu Badatel jakož i těm, kdo projekt propagují. Projekt je také podporován grantem MŠMT č. 2E06029 „STM-Morava“.*

## ZAVÁDĚNÍ E-LEARNINGOVÝ AKTIVIT DO VÝUKY NA FCHT UNIVERZITY PARDUBICE

M. VLČEK<sup>1</sup>, V. VLČKOVÁ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>KOAnCH FCHT, Univerzita Pardubice

<sup>2</sup>KEMCH FCHT, Univerzita Pardubice

Korešpondenční autor: miroslav.vlcek@upce.cz

Práce se zabývá problematikou zavádění e-learningu do vzdělávacího procesu na Fakultě chemicko-technologické Univerzity Pardubice a to jak z pohledu jeho organizačního a technického zajištění ze strany vedení fakulty, tak i z pohledu učitelů využívajících tento druh výukových aktivit. Jsou zde též diskutovány současné možnosti vzdělávání vysokoškolských pedagogů v oblasti e-learningu pohledem autorů příspěvku, kteří absolvovali takové vzdělávací kurzy [1]. Rozebírá se zde současný stav a možnosti využití e-learningu jak v distančním vzdělávání, tak i v rámci denního studia jako efektivní doplněk prezenční formy výuky tzv. „blended learning“ [2]. Jsou zde diskutovány konkrétní kroky prováděné v současné době v oblasti tvorby studijních podpor pro posluchače bakalářského studia v předmětu Obecná a anorganická chemie, který je povinný pro všechny posluchače studující na FCHT a první odezvy studentů na aplikaci těchto aktivizujících forem výuky.

*Práce vznikla za podpory grantu FRVŠ 1832/2007*

[1] Vejvodová J.: Challenges of European Net-Trainers: Transnational online course. /In / Information and Communication Technology in Education. Ostrava : Univerzita v Ostravě, 2006. s. 75-81. ISBN 80-7368-199-4

[2] Vlčková, V.: Zkušenosti s e-learningem v předmětu Aplikovaná statistika. Forum Statisticum Slovaca, 2, 3, s. 191-201, (2006). ISSN 1336-7420.

## CHEMICKÁ SOUTĚŽ PRO ŽÁKY A STUDENTY - LABYRINT 2006

M. PAVLÍČEK<sup>1</sup>, M. KLEČKOVÁ<sup>2</sup>, M. VAŠÍČKOVÁ<sup>1</sup>, T. ŠTOSOVÁ<sup>3</sup>, P. CANKAŘ<sup>4</sup>, L. KVÍTEK<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta

<sup>2</sup>Univerzita Palackého Olomouc, Přírodovědecká fakulta, Katedra anorganické chemie

<sup>3</sup>Univerzita Palackého Olomouc, Přírodovědecká fakulta, Katedra biochemie

<sup>4</sup>Katedra organické chemie, PŘF UP v Olomouci, Tř. Svobody 8, 771 46 Olomouc

Korešpondenční autor: marek.pavlicek@upol.cz

V rámci projektu Soutěže tvořivosti mládeže (STM - Morava) byla pro školní rok 2006 - 2007 připravena chemicky zaměřená korespondenčně - internetová soutěž Labyrint. Pilotní projekt Labyrint 2006 byl koncipován jako tříkolový, závěrečné finálové „univerzitní“ kolo proběhlo v rámci Konference mladých přírodovědců 2007 na UP v Olomouci. Do 1. ročníku soutěže Labyrint se zaregistrovalo cca 248 žáků a studentů. Aktivně se hry zúčastnilo 86 soutěžících - hráčů, kteří řešili jednotlivé soutěžní úlohy ve dvou věkových kategoriích prostřednictvím internetu nebo korespondenční formou. Je třeba zdůraznit, že celá soutěž byla operativně upravována, neboť byly v průběhu soutěže získávány cenné informace od aktivně zapojených žáků a studentů, i pedagogů. U většiny soutěžících byl projekt Labyrint 2006 - 2007 přijat velmi kladně. Zkušenosti získané při realizaci prvního ročníku soutěže Labyrint budou zúročeny v následujícím ročníku, který zahájíme v říjnu 2007, kdy budou probíhat korespondenčně-internetové soutěže ve čtyřech variantách - chemická, fyzikální, matematická a přírodovědná. Zvažujeme také odnož chemické varianty soutěže se zaměřením na její aplikaci do praxe.

*Poděkování grantu STM Morava MŠMT NPV II 2E06029.*

[1] PAVLÍČEK, Marek. Labyrint : Internetová laboratoř pro všechny mladé chemiky [online]. 2006 , 3.dubna 2007 [cit. 2007-06-12]. Dostupný z WWW:

## POPULARIZACE STUDIA PŘÍRODNÍCH VĚD FORMOU SOUTĚŽÍ ŠKOLNÍCH KOLEKTIVŮ

L. ZAJONCOVÁ<sup>1</sup>, P. TARKOWSKI<sup>1</sup>, L. KVÍTEK<sup>2</sup>, J. SOUKUPOVÁ<sup>3</sup>, T. ŠTOSOVÁ<sup>1</sup>, V. FADRŇÁ<sup>2</sup>, R. MENZELOVÁ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Palackého Olomouc, Přírodovědecká fakulta, Katedra biochemie

<sup>2</sup>Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta

<sup>3</sup>Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta, Katedra fyzikální chemie

Korešpondenční autor: ludmila.zajoncova@upol.cz

Většina ekonomicky vyspělých zemí se potýká s poklesem zájmu mladé generace o studium přírodních věd a

s tím souvisejícím nezájmem o práci vědeckého pracovníka. Tento trend se nevyhnul ani naší zemi.

Proto je realizován projekt STM-Morava, jehož cílem je zvýšení zájmu mládeže o přírodní vědy pomocí praktických činností, které modelují reálné postupy vědeckého výzkumu formou nejrůznějších typů soutěží. Jedna část tohoto projektu nazvaná „Věda je zábava“ je zaměřená na školní kolektivy, a to od základních škol 1. stupně až po střední školy. Základem bylo založení přírodovědných kroužků na školách, do kterých se mohou hlásit studenti bez ohledu na svůj prospěch. Kroužky byly podporovány v činnosti ze strany Přírodovědecké fakulty UP Olomouc jak metodicky, tak materiálně. Vyvrcholením práce žáků a studentů v kroužcích bylo vypracování společné písemné práce a pozvání zástupců kroužků na vědeckou konferenci. Dílčího úkolu „Věda je zábava“ se zúčastnilo 250 žáků a studentů z 21 základních a středních škol, převážně z Olomouckého kraje. Aby mohlo být vyhodnoceno naše působení na členy kroužků, byly vypracovány ankety, které sledují nejen názory zúčastněných žáků a studentů, ale také názory jejich spolužáků, učitelů a rodičů.

V následujícím školním roce bude vyhlášeno veřejné kolo soutěže, do kterého se mohou hlásit školní kolektivy z Olomouckého kraje, popřípadě v celé České republice, neboť veškerá činnost přírodovědných kroužků bude koordinována prostřednictvím webových stránek.

*Autoři děkují za finanční podporu grantu MŠMT č. 2E06029 „STM-Morava“ v rámci Národního programu výzkumu II - Lidské zdroje.*

## VEDECKÁ ČINNOST PROFESOROV Š. SCHENEKA A R. SCHELLEHO NA BANSKOŠTIAVNICKEJ AKADÉMII

I. HERČKO

*Ústav vedy a výskumu Univerzity Mateja Bela*

Korešpondenčný autor: [ivan.hercko@umb.sk](mailto:ivan.hercko@umb.sk)

Významnú úlohu v dejinách chémie na Slovensku zohrali dvajavnikajúci profesori banskoštiavnickej Baníckej a lesníckej akadémie - Štefan Schenek (1830-1909) a Róbert Schelle (1851-1925).

Š. Schenek nastúpil vo februári 1870 na Katedru chémie a fyziky na Baníckej a lesníckej akadémii ako vedúci katedry, tu pôsobil až do roku 1892. V roku 1889 bol vymenovaný za hlavného banského radcu a dopisujúceho člena Uhorskej akadémie vied. Z novších metód sa zaoberal spektrálnou analýzou minerálov, minerálnych vôd a hľadal spôsoby, ako získavať meď z cementačných hmôt v Smolníku. Po svojom príchode do Banskej Štiavnice dal návrh, aby postavili v Banskej Štiavnici plynáreň vypracoval konštrukciu plynového generátora. Na svetovej hospodárskej výstave vo Viedni v roku 1873

získal tento prístroj bronzovú medailu.

R. Schelle už ako praktikant pôsobil najprv v analytickom ústave banského riaditeľstva v Banskej Štiavnici a od 31. októbra 1875 bol prvým asistentom profesora Š. Scheneka na Katedre všeobecnej chémie (1875-1878). Po jeho odchode v roku 1892 nastúpil na jeho miesto profesora chémie a vedúceho Katedry všeobecnej a elementárnej chémie. V roku 1904 bol vymenovaný za hlavného banského radcu a v roku 1916 odišiel do dôchodku. Vyučoval však ešte aj v roku 1918, keď bol vymenovaný za ministerského radcu.

Významné úspechy a uznania dosiahol riešením problému odstriebrovania medi, prípravy čistého telúru a stanovenia cínu elektroanalýzou. V odborných kruhoch sa zapísal tiež svojou metódou odstraňovania striebra z čiernej mosadze. Zato vynález dostal roku 1885 na celouhorskú výstavu medailu s uznaním konštatovaním, že touto metódou založil nové priemyselné odvetvie. Jeho najväčšou vedeckou zásluhou však bolo, že získal čistý telúr a právom s ním považuje za vynálezcu výroby telúru.

## Prednášky – sekcia 4

### ODPADY - ZDROJ ZNEČISTENIA PROSTREDIA. ORIENTÁCIA CVIČENÍ Z APLIKOVANEJ CHÉMIE NA MONITOROVANIE ŽIVOTNÉHO PROSTREDIA.

M. FESZTEROVÁ

*Univerzita Konštantína Filozofa, Fakulta prírodných vied, Katedra chémie, Tr. A. Hlinku, 1, 949 74 Nitra*

Korešpondenčný autor: [mfeszterova@nextra.sk](mailto:mfeszterova@nextra.sk)

Jedným z najzávažnejších prejavov negatívneho vplyvu človeka na prírodu je tvorba odpadov. Vznik určitého množstva odpadov sprevádza každú ľudskú činnosť, výrobné postupy aj spotrebu materiálu. Odpady vznikajú počas trvania celého spoločenského reprodukčného procesu, počínajúc ťažbou surovín, ich úpravou, technologickým spracovaním na výrobky a využívaním výrobkov. Príspevok je zameraný na teoretický popis a praktické postupy jednoduchých pokusov so vzorkami odpadov, s akcentom na ich nežiadúci dopad na zložky životného prostredia. Použitie pomôcky a chemikálie boli zvolené tak, aby v maximálnej miere uplatňovali medzipredmetové vzťahy. Hlavným cieľom je vysoká didaktická účinnosť demonštrácie pozorovaného javu - vplyv odpadov na životné prostredie.

*Táto práca vznikla s podporou grantov VEGA 1/3276/06, 1/3540/06 a CGA VI/2/2007.*

- [1] HILBERT, H. Metóda hodnotenia antropického tlaku v krajine v koncepcii synantropizácie - desynantropizácie. In: Acta Universitatis Matthiae Bellii (Sekcia Ekológia a environmentálna výchova), 1, 1998, s.1 - 35. ISBN 80-8055-173-1.
- [2] KONTRIŠOVÁ, O. - BESEDA, I. - BUBLINEC, E. - KOČÍK, K. - LADOMERSKÝ, J. - SAMEŠOVÁ, D. Globálne problémy životného prostredia. Zvolen: Vydavateľstvo TU vo Zvolene, 1998. s. 11, 57, 91 - 93. ISBN 80-228-0709-5.
- [3] Prousek, J - Čík, G. 2004. Základy ekológie a environmentalistiky. Bratislava : STU, 2004 s. 212, ISBN 80-227-2097-6

D: Vedy o výchove a vzdelávaní, Suppl. 1 - Aktuálne vývojové trendy vo vyučovaní prírodných vied. Trnava : PF TU, 2005, s. 93-96. ISBN 80-8082-049-X.

- [3] FESZTEROVÁ, M. - BARÁTH, O. Interdisciplinárne aspekty aplikovanej chémie. In: XXIV. mezinárodný kolokvium o řízení osvojecího procesu. Brno : Univerzita obrany, Fakulta ekonomiky a managementu, 2006, s. 45. ISBN 80-7231-139-5.

## Prednášky – sekcia 5

### UČEBNÁ POMÔCKA NA SLEDOVANIE VLASTNOSTÍ BIOLOGICKÉHO MATERIÁLU - PRENOSNÝ ŠKROBOMER

M. FESZTEROVÁ<sup>1</sup>, O. BARÁTH<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Konštantína Filozofa, Fakulta prírodných vied, Katedra chémie, Tr. A. Hlinku, 1, 949 74 Nitra

<sup>2</sup>UKF, FPV, Katedra chémie, Tr.A.Hlinku 1, 949 74 Nitra

Korešpondenčný autor: [mfeszterova@nextra.sk](mailto:mfeszterova@nextra.sk)

Prenosný škrobomer bol realizovaný ako priemyselný vzor V 19526 - 87 (autorské osvedčenie) a odskúšaný na stanovenie obsahu škrobu v zemiakoch. Spoločnosť a presnosť prístroja sme porovnali s ďalšími metódami (Hošpes-Pecoldova váha, polarimetria). Pre školské účely bol vyhotovený zmenšený prístroj, v ktorom možno analyzovať vzorku už pri hmotnosti 2500 g. Kolektívna práca so škrobomerom a možnosti uplatňovania medzipredmetových vzťahov (matematika, chémia, fyzika, biológia) umožňujú integrovaný prístup v prírodovednom vzdelávaní na rôznych školách (gymnáziách, stredných odborných školách a učilištiach). V príspevku uvádzame princíp a postup stanovenia na základe výsledku sériových analýz. Bolo vykonané posúdenie vhodnosti prístroja ako učebnej pomôcky a matematicko - štatistické vyhodnotenie.

Táto práca vznikla s podporou grantov CGA VI/2/2007 a KEGA 3/4034/06.

- [1] BARÁTH, O. - FESZTEROVÁ, M. Pedagogicko - didaktické, fyziologické a psychologické aspekty rozvíjania zručností a návykov. In: XVIII. DIDMATECH „Technika - Informatyka - Edukacja“. Rzeszów : FORSE, 2005. s. 128 - 134. ISBN 83-88845-56-X.
- [2] FESZTEROVÁ, M. - BARÁTH, O. Analýza pracovného postupu ako didaktický základ prípravy a priebehu laboratórnych cvičení. In: Acta Facultatis Paedagogicae Universitatis Tyrnaviensis Séria

### ZDROJE HUMINOVÝCH LÁTEK V ČESKÉ REPUBLICE

L. MADRONOVÁ<sup>1</sup>, J. NOVÁK<sup>1</sup>, J. KOZLER<sup>1</sup>, P. ROJÍK<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Výzkumný ústav anorganické chemie, a.s. Ústí nad Labem

<sup>2</sup>Sokolovská uhelná a. s., Sokolov

Korešpondenčný autor: [libuse.madronova@vuanch.cz](mailto:libuse.madronova@vuanch.cz)

V Českej republike se nacházejí bohaté zdroje huminových látek (HS). V severních a severozápadních Čechách se nacházejí HS v horních vrstvách hnědouhelných pánví, kde hnědé uhlí zoxidovalo na tak zvaný oxyhumolit. Jedná se o materiály, které jsou ekvivalentní leonarditu. Mezi podřadná uhlí dále patří lignit, nejmladší druh hnědé uhlí. Jeho ložiska jsou na jižní Moravě a zasahují do Rakouska a na Slovensko. V jižních Čechách jsou ložiska rašeliny přechodového typu, která jsou též bohatá na HS. Z uvedených ložisek byly po dobu 5 let odebrány vzorky a byla hodnocena jejich kvalita. Sledovanými parametry byly obsah vody, popela, HS stanovených dopočtem (HSDOP) a loužitelných (HSL), fulvokyselin (FA), složení anorganického podílu, obsah rizikových prvků, celková acidita a obsah karboxylových skupin. Průměrné hodnoty parametrů jednotlivých surovin jsou v tabulce 1. V tabulce nejsou uvedeny obsahy Cd, Pb a Hg, které jsou pod limitními hodnotami pro použití HS v zemědělství. Byly určeny lokality, které jsou vhodné pro těžbu surovin na průmyslovou výrobu alkalických humátů a huminových kyselin pro použití v zemědělství, humánní a veterinární medicíně, biotechnologiích, jako sorbentů a v dalších oblastech. Byly posouzeny i suroviny, ze kterých lze připravit HS oxidačními procesy. Pro tyto procesy byly vybrány suroviny s nízkým obsahem rizikových prvků. Nejlepší surovinou uhelného typu je oxyhumolit z lomu Václav u Duchcova v severních Čechách, který v přepočtu na sušinu obsahuje 75 % HS, 20 % popela a 5 % podílu, který není loužitelný v alkalickém prostředí. Rašelina obsahuje 46 % HS, 21 % popela a 33 % nerozloženého rostlinného materiálu. U všech lokalit jsou též

posouzeny geologické poměry, které ovlivnily tvorbu HS z rostlinných materiálů.

Tato práce vznikla v rámci řešení projektu ev. číslo FT-TA/038 s finanční podporou Ministerstva průmyslu a obchodu České republiky.

vzorek	popel	DN <sub>200</sub>	DN <sub>50</sub>	FA	celková acidita meq/g HS	COOH
<b>OHNĚNÉ SUŠINY</b>						
<i>Iron Václav a Tachov</i>						
<i>číslo lokality</i>	7,3-13,1	6,29-12,6	26,7-27,3	1,32-3,39	6,30-10,3	1,06-2,60
<i>číslo vzorku</i>	43442123					
<b>Složení:</b>						
<i>Iron Václav</i>	31,56	45,44	46,39	3,44	65,20	1,11
<i>Iron Silvestr</i>	11,44	88,56	63,11	2,01	6,53	1,89
<i>Iron Hledčard</i>	13,8	86,2	84,7	0,96	7,52	0,88
<i>Iron Marie</i>	9,08	90,92	84,16	2,31	7,96	2,80
<i>Iron Dražba</i>	7,87	18,9	31,1	11,7	0,3	1,18
<i>Iron Jiří</i>	21,5	42,7	37,3	25,5	8,42	88,94
<i>Iron Lumnice</i>	21,9	71,4	24,1	36,1	34,5	22,6
<i>Iron Jirák</i>	2,24	2,57	7,94	9,23	1,96	2,16
<b>LEGENDA</b>						
<i>Mikulčice</i>	16,0	31,3	60,9	34,0	23,3	28,3
<i>RAMPENA</i>						
<i>Branná</i>	23,1	77,0	45,2	5,24	6,18	0,87
<i>Světlík</i>	13,8	19,4	80,6	84,3	46,9	63,0
					0,37	0,97
					6,22	7,82
						0,52

vzorek	majoritní prvky [mg/kg]			vzácné prvky [mg/kg]		
	Al	Si	Fe	Cu	Zn	As
<b>OHNĚNÉ SUŠINY</b>						
<i>Iron Václav a Tachov</i>						
<i>číslo lokality</i>	1,0-1,67	1,8-2,1	0,8-2,02	2,0-1,0	14-52	4-1,0
<i>číslo vzorku</i>	43442123					
<b>Složení:</b>						
<i>Iron Silvestr</i>	2,01	2,41	1,72	66	7	40
<i>Iron Hledčard</i>	2,37	3,26	0,60	0,01	0,03	0,01
<i>Iron Marie</i>	1,0	1,53	0,96	34	15	73
<i>Iron Dražba</i>	0,98	4,23	1,53	0,93	0,53	3,25
<i>Iron Jiří</i>	2,9	8,1	4,91	16,2	1,1	2,95
<i>Iron Lumnice</i>	0,89	3,61	5,78	31,8	0,12	4,57
<i>Iron Jirák</i>	1,65	17	64	160	35	190
<b>LEGENDA</b>						
<i>Mikulčice</i>	1,79	4,52	2,24	7,54	1,32	2,78
<i>RAMPENA</i>						
<i>Branná</i>	2,54	3,39	2,05	48	46	21
<i>Světlík</i>	1,40	2,94	3,6	1,30	22	22-30
						<10

TABULKA 1 Základní charakteristiky a složení anorganického podílu různých surovin (všechny hodnoty jsou vztaženy na sušinu)

### HUMÁTY KOVŮ

S. KRŽIŽENEC<sup>1</sup>, S. HEJDA<sup>2</sup>, T. BRUNA<sup>2</sup>, M. NOVÁK<sup>2</sup>, V. MALIMÁNKOVÁ<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Univerzita Jana Evangelisty Purkyně v Ústí nad Labem, Fakulta životního prostředí

<sup>2</sup> Univerzita Jana Evangelisty Purkyně v Ústí nad Labem

Korešpondenční autor: Sylvie.Krizzenecka@ujep.cz

Pojem humát kovu poprvé použil C. K. Horner [ 1 ]. Ten již v roce 1934 připravil sloučeninu, která byla nerozpustná ve vodě. K roztoku humátu draselného bylo přidáno tolik železa, aby výsledná koncentrace v roztoku byla deset až dvacet procent železa. Železo bylo přidáno do roztoku humátu ve formě síranu, vinanu a citrátu. Připravený humát byl nazván jako humát železa.

Humáty kovů jsou obecně sloučeniny huminových látek s polyvalentními ionty kovů i nekovů. Dají se připravit z humátu sodného či draselného reakcí s jakýmkoliv iontem s vyšším oxidačním číslem. Vzniklé kovové humáty jsou pevné látky, které se rozpouští ve vodných roztocích alkalických hydroxidů. V kyselé oblasti jsou nerozpustné.

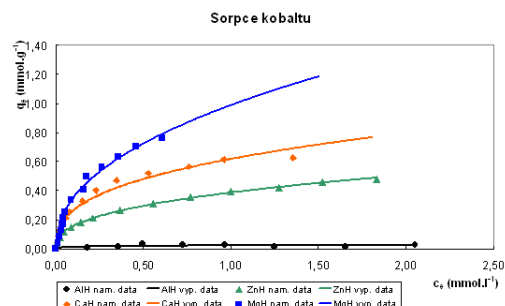
Nejznámějším humátem kovu je humát železa [ 2,3 ], který se využívá v různých odvětvích, například v zemědělství jako přípravek podporující růst rostlin [ 3 ] nebo jako aditivum do krmiv hospodářských zvířat [ 3 ].

V rámci projektu „Pokročilé sanační technologie a procesy“ byly připraveny humáty železa, hliníku, vápníku, hořčíku a zinku. Na tyto humáty byly sorbovány různé polutanty vyskytující se v životním prostředí (těžké kovy - Co a Cu, barviva - Methylenová modř a Egacidová oranž, chlorfenoly - 4-chlorfenol, 2,4-dichlorfenol, 2,4,5-trichlorfenol). Při sorpci kovů byla sledována i iontově-výměnná schopnost a stabilita připravených humátů.

Z připravených humátů se jako nejlepší sorbent pro proměřované polutanty v životním prostředí jeví humát zinku. Má vynikající sorpční vlastnosti jak pro anorganické, tak organické sloučeniny. Nejméně vhodným sorbentem je humát železa, jelikož v několika případech nebyl schopný sorbovat proměřované množství polutantu. Průměrným sorbentem je humát hlinitý.

Výzkum byl proveden v rámci projektu Pokročilé sanační technologie a procesy č. 1M0554 programu Výzkumná centra PP2-DP01 MŠMT.

[1] C. K. Horner, D. Burk, S. R. Hoover, Plant Physiol. 9 (3) (1934) 663  
 [2] B. E. Rehberg, G. L. Smith, ACS Symp. Ser. 668, 268-275 (1997) American Chemical Society CODEN: ACSMC8. ISSN: 0097-6156  
 [3] L. N. Hjersted, Kemiron, Inc.. Iron humate product. Int. Cl.: CO5F 11/02. United States Patent Hjersted, Patent Numer: 5,411,569. Date of Patent: May 2 (1995)



Obrázek č. 1 Freundlichovy izotermy - závislost rovnovážné sorpční kapacity (q<sub>e</sub>) humátů na rovnovážné koncentraci kobaltu (c<sub>e</sub>)

## REDOXNÍ PROCESY SÍRY, ŽELEZA A MANGANU V UMĚLÉM MOKŘADU

J. ŠÍMA<sup>1</sup>, K. DIÁKOVÁ<sup>2</sup>, V. HOLCOVÁ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích, Biologická fakulta, Katedra matematiky, fyziky a chemie

<sup>2</sup>Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích, Biologická fakulta, Katedra ekologie a hydrobiologie

Korešpondenčný autor: [sima@bf.jcu.cz](mailto:sima@bf.jcu.cz)

Přírodní způsoby úpravy odpadních vod jsou v současné době stále oblíbenější mezi odborníky i laickou veřejností. Perspektivní přístup k čištění odpadních vod odtékajících zejména z malých obcí a sídel představuje využití umělých mokřadů [1]. Umělý mokřad je ekosystém, který je schopen odstraňovat z upravované vody suspendované tuhé částice, organické znečištění a částečně rovněž sloučeniny dusíku a fosforu. Předpokladem správné funkce takového systému je přítomnost gradientů redoxního potenciálu ve vegetačním poli. V rámci této studie byly testovány oxidačně-redukční vlastnosti umělého mokřadu s horizontálním podpovrchovým tokem nacházejícího se v obci Slavošovice ve vzdálenosti 15 km od Českých Budějovic. Odpadní voda je zde upravována ve dvou vegetačních polích osazených rákosou obecnou (*Phragmites australis*), jejichž šířka je 22 m, délka 17 m a hloubka činí 0,9 m. Vzorky pro analýzu byly odebírány z přítoku, nátokové zóny, odtoku a z vybraných míst vegetačního pole z hloubky 20 a 60 cm pod povrchem lože mokřadu. Jako indikátor oxidačně-redukčních vlastností studovaného systému sloužilo zastoupení jednotlivých oxidačních stavů síry ( $\text{SO}_4^{2-}/\text{S}^{2-}$ ) a železa ( $\text{Fe}^{III}/\text{Fe}^{II}$ ) a rozpustných a nerozpustných forem manganu ve vzorcích intersticiální vody [2,3]. S ohledem na výrazně redukční vlastnosti mokřadu převládala v upravované vodě forma  $\text{Fe}^{II}$ , současně byla pozorována redukce síranů na sulfidy (obr. 1) a jejich následné vysrážení jako  $\text{FeS}$ . V důsledku aerace vegetačního pole prostřednictvím kořenů rostlin však docházelo v některých zónách k reoxidaci  $\text{Fe}^{II}$  a  $\text{Mn}^{II}$ . Střídání zón s oxidačními a redukčními vlastnostmi uvnitř vegetačního pole má klíčový význam pro odstraňování dusíku a organického znečištění z odpadní vody.

Tato studie byla podpořena Grantovou agenturou Akademie věd ČR, projekt KJB601410502.

- [1] Kadlec R. H., Knight R. L.: Treatment Wetlands. Lewis Publishers, Boca Raton 1996.
- [2] Šíma J., Holcová V., Dušek J., Diáková K.: Chem. Listy 100, 911 (2006).
- [3] Diáková K., Holcová V., Šíma J., Dušek J.: Chem. Biodiv. 3, 1288 (2006).

Koncentrace síranů v profilu umělého mokřadu. Vzorky byly odebírány v průběhu roku 2006 z přítoku (P), nátokové zóny (NZ), odtoku (ODT) a z jednotlivých bodů vegetačního pole vzdálených 1, 2, 3, 5 a 10 metrů od NZ (VZ1 - VZ10).

## ELUÁCIA RIZIKOVÝCH PRVKOV RÔZNYMI EXTRAKČNÝMI ČINIDLAMI

J. TOMÁŠ, P. LAZOR, J. BYSTRICKÁ, P. TREBICHALSKÝ, L. LAHUČKÝ, D. BAJČAN

Katedra chémie, Fakulta biotechnológie a potravinárstva, SPU v Nitre, Tr. A. Hlinku 2, 949 01 Nitra

Korešpondenčný autor: [jan.tomas@uniag.sk](mailto:jan.tomas@uniag.sk)

Územie Štiavnických vrchov a pril'ahlych pozemkov, ktoré sa nachádzajú v blízkosti toku Štiavnického potoka bolo dlhé stáročia zaťažované odpadmi z banskej činnosti, ktoré kontaminovali celé územie inundačného pásma. Navyše sa monitorovaná lokalita pokladá za najvýznamnejšiu geochemickú anomáliu na území Slovenskej republiky. Toto územie sa nielen v minulosti ale aj dnes využíva na produkciu poľnohospodárskych produktov. Ich kvalita je podmienená stupňom kontaminácie, ktorý je závislý od geomorfológie konkrétneho pozemku. V práci sme sa zamerali na sledovanie variability úrovne kontaminácie pôdy a na nej dopostovanej rastlinnej produkcie. Vytipovali sme niekoľko pozemkov, ktoré reprezentujú rôzne pedologické pomery, na ktorých sme sledovali správanie sa rizikových kovov v systéme pôda - rastlina, ako významného faktora kontaminácie potravinového reťazca. Získané výsledky analýz pôdnych a rastlinných vzoriek poukazujú na fakt, že sledované územie alúvia Štiavnického potoka je silne kontaminované ťažkými kovmi, najmä Cd, Pb, Zn a Cu, ktorých obsahy v rôznych extrakčných činidlách takmer celoplošne (v rámci sledovaných pozemkov) prekračujú limitné hodnoty stanovené príslušnými zákonmi. Ide o pozemky v tesnej blízkosti toku potoka. Obsahy sledovaných prvkov v extrakte lúčavky kráľovskej sa pohybovali v nasledovných intervaloch: Cd (7,56 - 16,8 mg.kg-1), Pb (69,0-1824,0 mg.kg-1), Zn (112,0-2102,0 mg.kg-1) a Cu (19,4 - 127,0 mg.kg-1). V extrakte 1 mol.dm-3  $\text{NH}_4\text{NO}_3$ , ktorý predstavuje obsah mobilných foriem ťažkých kovov, sa obsahy pohybovali v nasledovných intervaloch: Cd (0,79 - 3,6 mg.kg-1), Pb (0,48 - 32,15 mg.kg-1), Zn (30,2 - 156,0 mg.kg-1). Obsah Cu neprekročoval kritickú hranicu. Na základe získaných výsledkov je možné jednoznačne konštatovať, že hygienický stav pôdy sledovaného územia je zlý a kvalita dopostovanej produkcie je nízka, čo má za následok problémy pri uvádzaní poľnohospodárskych komodít z oblasti Štiavnických vrchov do obehu.

Príspevok vznikol podporou VEGA projektu č. 1/2428/05

- [1] TÓTH, T. - VOLLMANNOVÁ, A. - MUSILOVÁ, J. - BYSTRICKÁ, J. - HEGEDUSOVÁ, A. - JO-

MOVÁ, K. 2006. Rizikové prvky antropogénneho pôvodu v pôdach stredného Spiša. In: Chemické listy : časopis pro průmysl chemický. - ISSN 0009-2770. - Roč. 100, č. 8 (2006), s. 701-702.

[2] HRUŠKOVIČOVÁ, A.- MUSILOVÁ, J. 2006. Sledovanie ťažkých kovov v jablkách a hruškách. In: Aktuálne problémy riešené v agrokomplexe. Zborník z XI. ročníka medzinárodného vedeckého seminára na CD nosiči. SPU, Nitra: 2006. Slovenská republika, s.11-16. ISBN 80-8069-799-X.

[3] ÁRVAY, J. - STANOVIČ, R. - HARANGOZO, L. 2006. Riziká metalickej kontaminácie v alúviu Štiavnického potoka. In: Veda mladých 2006 (Zborník abstraktov zo 4. vedeckej konferencie s medzinárodnou účasťou). Nitra: SPU, 2006. s. 55. ISBN 80-8069-742-6

Produkcia fotosyntetických pigmentov bola vo všetkých testovaných kombináciách výrazne inhibovaná, okrem všetkých kombinácií Se(IV) so zinkom, najvyššej koncentrácie Se(VI) (223,3 mg/l) so všetkými testovanými koncentraciami zinku a najnižšej koncentrácie Se(VI) (19,1 mg/l) s kadmim, v prípade ktorých bola produkcia chlorofylov stimulovaná.

*Príspevok vznikol vďaka podpore grantov UK/157/2007 a VEGA 1/4361/07.*

[1] Newman, M.C., Unger, M.A. (2003): Fundamentals of Ecotoxicology. CRC Press Company, 458 s.

[2] Wang, J., Zhang, M., Xu, J., Wang, Y. (1995): Reciprocal effect of Cu, Cd, Zn on a kind of marine alga. Water Res., 29: 209 - 214

## ÚČINOK Se(IV) A Se(VI) V KOMBINÁCIÍ S Cu, Zn A Cd NA SLADKOVODNÚ RIASU DESMODESMUS QUADRICAUDA

J. PASTIEROVÁ, A. FARGAŠOVÁ

Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra ekozozológie a fyziotaktiky

Korešpondenčný autor: [pastierova@fns.uniba.sk](mailto:pastierova@fns.uniba.sk)

V reálnych podmienkach predstavuje toxický účinok polutantov, vrátane kovov, vždy účinok kombinácií alebo zmesí chemických látok. Výsledné výstupy z multiplicitných toxikantov môžu pri porovnaní s výstupmi získanými s jednotlivými látkami samostatne dramaticky zmeniť vplyvy ako na organizmus tak aj na celý ekosystém (1).

Cieľom práce bolo hodnotenie interakčných vzťahov medzi Se(IV) a Se(VI) a niektorými vysoko toxickými (Cd) a esenciálnymi kovmi (Cu, Zn) na rast a produkciu fotosyntetických pigmentov riasy *Desmodesmus quadricauda*. Vybraná riasa bola vystavená účinku jednotlivých kombinácií po dobu 7 dní. V experimentoch sa skúmali vždy 3 koncentrácie selénu a 5 rôznych koncentrácií vybraného kovu. Vyhodnotenie interakčných vzťahov sa uskutočnilo pomocou modifikácie matematického modelu podľa Wanga a kol. (2).

Selén v dvoch oxidačných stupňoch (Se(IV) a Se(VI)) mal v kombináciách s esenciálnymi kovmi (Cu, Zn) antagonistický účinok na rast riasovej suspenzie, okrem kombinácií keď bol v prostredí Se(IV) (32 mg/l, resp. 38,8 mg/l) a zinok (4,8 mg/l) a kombinácií Se(VI) (19,1 mg/l, resp. 62,6 mg/l) s meďou (1,1 mg/l, resp. 1,9 mg/l) kedy bol pozorovaný synergický účinok. Všetky testované koncentrácie Se(IV) s najvyššou použitou koncentraciou kadmia (1,7 mg/l) mali na rast riasovej suspenzie antagonistický účinok, zatiaľ čo najnižšia testovaná koncentrácia Se(VI) (19,1 mg/l) mala v kombinácii s kadmim (0,9 mg/l, resp. 1,7 mg/l) synergický účinok.

## Prednášky – sekcia 5

### LET'S PLAY THE GREEN GAME! THE BRAIN'S OWN MARIJUANA.

A.E. LIS

Politechnika Gdańska, ul. Narutowicza 11/12, 80-952 Gdańsk, Polska

Korešpondenčný autor: [anna.elzbieta.lis@gmail.com](mailto:anna.elzbieta.lis@gmail.com)

Marijuana is a psychoactive product of the plant *Cannabis sativa* and consists of dried mature inflorescences and subtending leaves of pistillate ("female") plants. The major biologically active chemical compound in cannabis is  $\Delta^9$ -tetrahydrocannabinol, commonly referred to as THC.

Cannabinoids bind to cannabinoid receptors in brain. There are currently two known types of cannabinoid receptors, discovered in the 1980's:

- CB1 receptors, found primarily in the brain, specifically in the basal ganglia and in the limbic system, including the hippocampus. CB1 receptors appear to be responsible for the euphoric and anticonvulsive effects of cannabis.
- CB2 receptors, almost exclusively found in the immune system, with the greatest density in the spleen. CB2 receptors appear to be responsible for the anti-inflammatory and possibly other therapeutic effects of cannabis.

There are three types of cannabinoids:

- herbal cannabinoids
- endogenous cannabinoids

- synthetic & patented cannabinoids

Endocannabinoids are naturally produced in the bodies of animals. For example anandamide is derived from the essential fatty acid arachidonic acid. It has a pharmacology similar to THC, although its chemical structure is different. Endocannabinoids and their both CB1 and CB2 receptors form a system that releases GABA which controls dopamine in brain.

- [1] Roger A. Nicoll, Bradley E. Alger, „Marihuana w naszych mózgzach”, *Świat Nauki*, 1(161), 2004, 24-31
- [2] Jerzy Z. Nowak, Jolanta B. Zawilska, Receptory i mechanizmy przekazywania sygnału, *Medicon*, Warszawa 2004
- [3] A. Kołodziejczyk, Naturalne związki organiczne, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 2006

## OBSAH KYSELINY CHLOROGENOVÉ A KÁVOVÉ V BAREVNÝCH ODRŮDÁCH BRAMBOR

M. ORSÁK

Česká zemědělská univerzita Praha, Fakulta agrobiologie, potravinových a přírodních zdrojů, Katedra chemie

Korešpondenčný autor: orsak@af.czu.cz

## FARBA - KVALITATIVNÝ PARAMETER RAJČIAKOVÝCH VÝROBKOV

J. LEHKOŽIVOVÁ<sup>1</sup>, J. KAROVIČOVÁ<sup>1</sup>, Z. KOHAJDOVÁ<sup>2</sup>, M. VOLDŘICH<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Slovenská technická univerzita, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav biotechnológie a potravinárstva, Oddelenie potravinárskej technológie

<sup>2</sup>Institute of Biochemical and Food Technology, Department of Food Technology, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK - 812 37 Bratislava, Slovakia.

<sup>3</sup>Vysoká škola chemicko-technologická v Prahe, Fakulta potravinárskej a biochemickej technológie, Ústav konzervace potravín a technologie masa

Korešpondenčný autor: jarmila.lehkozivova@stuba.sk

Farba je jedným zo znakov senzorickej akosti požívatín, je teda dôležitým kvalitatívnym znakom potravín, ktorá v mnohých prípadoch určuje voľbu a výber konzumentom. Farba čerstvých rajčiakov je daná kombináciou karotenoidových farbív (najviac lykopen). Ďalej sa na výslednej farbe podieľajú  $\alpha$ -,  $\beta$ -,  $\gamma$ - a  $\delta$ -karotény a xantofyly. Farbu ovplyvňuje obsah sušiny, stupeň rozmelnenia suroviny, pôsobenie kyslíka, teplota dosiahnutá pri spracovaní atď. [1].

Na stanovenie farby vzoriek rajčiakových výrobkov (kečupy a rajčiakové pretlakky) bol použitý spektrofotometer Minolta CM-2600d so svetelným zdrojom D65. Hrúbka vrstvy vzorky bola 5 mm. Hodnoty jasnosti  $L^*$  [-] sa vo vzorkách kečupov pohybovali v intervale od 31,25 do 40,86 a vo vzorkách pretlakov od 32,28 do 34,52. Z parametrov  $a^*$  [-] (červenosť) a  $b^*$  [-] (žltosť) sme vypočítali pomer  $a^*/b^*$ , ktorý sa používa ako smernica kvality rajčiakových výrobkov. Hodnoty 1,9 a vyššie znamenajú vynikajúcu farbu rajčiakových výrobkov, zatiaľ čo hodnoty pod 1,8 sa považujú za neprijateľné. Hodnoty pomeru  $a^*/b^* \geq 1,9$  mali všetky vzorky rajčiakových pretlakov, len 42% vzoriek kečupov. Dodatočne boli vypočítané veličiny: uhol farebného odtieňa  $h_{ab}$  [°] ( $h_{ab} = \arctan(b^*/a^*)$ , kde hodnota 0° vyjadruje čistú červenú a hodnota 90° zase čistú žltú) a sýtosť farby  $C^*$  [-] ( $C^* = (a^{*2} + b^{*2})^{0,5}$ , kde vzrastajúce hodnoty udávajú rastúcu saturáciu) [2, 3].

Meranie bolo uskutočnené na Ústave konzervace potravín a technologie masa Fakulty potravinárskej a biochemickej technológie VŠCHT v Prahe.

Podakovanie: Táto práca bola podporovaná grantom APVT č. 20-002904 a grantom VEGA č. 1/3546/06

- [1] Prokúpková, L., Novotná, P.: *Czech J. Food Sci.*, 16, 65-71 (1998).
- [2] Barreiro, J. A., Milano, M., Sandoval, A. J.: *J. Food Engin.*, 33, 359-371 (1997).
- [3] Intelmann, D., Jaros, D., Rohm, H.: *Eur. Food Res. Technol.*, 221, 662-666 (2005).

## ČISTENIE EXTRAKTOV STÉVIE CUKROVEJ

A. DANDÁR<sup>1</sup>, L. MINAROVIČOVÁ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Oddelenie potravinárskej technológie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava

<sup>2</sup>Slovenská technická univerzita, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav biotechnológie a potravinárstva, Oddelenie potravinárskej technológie

Korešpondenčný autor: lucia.minarovicova@stuba.sk

Na čistenie extraktov stévie cukrovej bola vybraná kombinácia roztoku  $FeCl_3$  a roztoku  $Ca(OH)_2$  pri troch rôznych pH hodnotách (9,0; 10,0 a 11,0) a rôznych refrakciách extraktu (1 - 6 %). Najlepšie výsledky boli dosiahnuté pri pH hodnote 9,0, pretože pri vyšších hodnotách pH boli vyššie straty steviozidov, čo je nežiaduce. So zvyšujúcim sa prídavkom  $FeCl_3$  a  $Ca(OH)_2$  a zároveň aj so zvyšujúcou sa Rf hodnotou dochádzalo k zvyšovaniu strát steviozidov. Najoptimálnejšie podmienky pre čistenie extraktov stévie cukrovej boli dosiahnuté pri nižších prídavkoch  $FeCl_3$  a  $Ca(OH)_2$ , pretože nedochádzalo k príliš vysokým stratám steviozidov,

aj keď hodnota absorpcie bola vyššia. Pri vyšších prídavkoch  $\text{FeCl}_3$  a  $\text{Ca}(\text{OH})_2$  bola hodnota absorpcie nízka, ale straty steviozidov boli vyššie. Vzniknuté straty steviozidov sa však dali znížiť následným premývaním filtrov, pričom sa však do systému vnašala voda. Prípadne by bolo možné II. filtráty z premývania filtrov použiť do niektorého stupňa extrakcie namiesto prídavku vody. Čo sa týka Rf hodnoty, výhodnejšie bolo pracovať pri vyšších respektíve stredných Rf hodnotách, pretože pri nižších Rf hodnotách je v systéme viac vody, čím by sa zvýšili náklady na odparovanie. Príliš vysoké Rf hodnoty taktiež neboli príliš vhodné, pretože sa musel zvýšiť prídavok  $\text{FeCl}_3$  a  $\text{Ca}(\text{OH})_2$ , čím zároveň dochádzalo aj ku zvýšeniu strát steviozidov.

*Práca vznikla za podpory grantu VEGA 1/2393/05.*

### ANTIMIKROBIÁLNY ÚČINOK PRODUKTOV METABOLIZMU KYSLOMLIEČNÝCH BAKTÉRIÍ.

E. KRAJČOVÁ<sup>1</sup>, M. GREIFOVÁ<sup>1</sup>, Z. GAJDOSOVA<sup>2</sup>, G. GREIF<sup>1</sup>, Š. SCHMIDT<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Slovenská technická univerzita, Fakulta Chemickej a Potravinárskej technológie, Radlinského 9, Bratislava, 812 37

<sup>2</sup>Slovenská technická univerzita, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav biotechnológie a potravinárstva, Oddelenie potravinárskej technológie

<sup>3</sup>Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav biotechnológie a potravinárstva

Korešpondenčný autor: [eva.krajcova@stuba.sk](mailto:eva.krajcova@stuba.sk)

Kultúry kyslomliečnych baktérií produkujú široké spektrum antimikrobiálne pôsobiacich látok, ktoré sú účinné proti mnohým mikroorganizmom, vrátane baktériám spôsobujúcich kazenie potravín alebo patogénov. Na antagonistických vlastnostiach sa podieľajú hlavne organické kyseliny: kyselina mliečna, octová, mravčia, propiónová, benzoová, fenylmliečna ako aj ďalšie metabolity: peroxid vodíka, oxid uhličitý, acetoín alebo bakteriocíny.

Antimikrobiálny účinok KMB nie je natoľko závislý od nízkej pH-hodnoty prostredia, ako od samotnej mikrobicídnej nedisociovaných kyselín. Nedisociované kyseliny prenikajú buncnou membránou a narúšajú trans-membránový potenciál. V práci bola testovaná mikrotitračnou metódou aktivita kyseliny fenylmliečnej voči *Staphylococcus aureus* a *Listeria monocytogenes* a mikrodilučnou metódou jej antifungálny účinok voči vybraným druhom vlákňitých húb (*Rhizopus oryzae*, *Mucor racemosus*) v závislosti od rôzneho pH (4; 4,5 5,5). Koncentrácií 20 mg/ml inhibuje rast *Staphylococcus aureus* a *Listeria monocytogenes*. Pre antifungálnu aktivitu stačia nižšie koncentrácie. Koncentrácia 10 mg/ml je IC 50 pre *Mucor racemosus*, *Rhizopus oryzae*. Čím nižšie je pH, tým väčší je jej inhibičný antibakter-

álny a antifungálny účinok.

*Práca bola podporená VEGA 1/2392/05, VEGA 1/3546/06*

## Prednášky – sekcia 6

### ASPEKTY ROZVOJA VLÁKNITÝCH MATERIÁLOV VO SVETE A U NÁS

M. JAMBRICH<sup>1</sup>, D. BUDZÁK<sup>2</sup>, J. KOCHAN<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Trenčianska univerzita, Fakulta priemyselných technológií, Katedra chémie a technológie polymérov a textilu

<sup>2</sup>Výskumný ústav chemických vlákien a.s., Štúrová 2, 059 21 Svit

<sup>3</sup>Chemosvit-Fibrochem, a.s., Štúrová 101, 059 21 Svit

Korešpondenčný autor: [mjambrich@post.sk](mailto:mjambrich@post.sk)

Príspevok je zameraný na informáciu o rozvoji výroby a spotreby vlákňitých materiálov súčasnosti a rozvojové smery v ďalšom období. Spotreba a výroba vlákien a vlákňitých materiálov prechádzali rôznymi stupňami vývoja. V Európe, v štátoch Severnej Ameriky a Japonsku dochádza k zvyšovaniu výroby špeciálnych a technických typov vlákien. Predpokladá sa, že v priebehu ďalších 10-15 rokov špeciálne a technické vlákna budú predstavovať viac ako 50% z celkovej výroby chemických a hutníckych vlákien.

Všeobecne sa uznáva, že hlavným východiskom zo súčasného stavu je transformácia výroby vlákňitých materiálov, výskumu ako aj vzdelávania včítane vysokoškolského vzdelávania v odbore. Ak nedôjde k celosvetovým prírodným a spoločenským katastrofám, predpokladá sa do roku 2050 nárast obyvateľstva na našej zemi na 11 mld. a spotreba vlákien 130 mil. ton. Ďalším dôležitým faktorom, ktorý už v tomto období podmieňuje rozvoj výroby vlákien je celosvetová globalizácia, čo sa prejavuje predovšetkým koncentráciou výrobcov vlákien a integráciou výrobných odborov (vertikálne spojenie). Nárast spotreby vlákien v ďalšom období sa bude zabezpečovať predovšetkým chemickými vláknami. Prírastok spotreby prírodných vlákien bude menší, nakoľko rozhodujúci podiel majú vlákna z rastlinného pôvodu (bavlna, ľan, konope, juta), ktorých rozvoj je podmienený predovšetkým osevnými plochami. Z doterajších štúdií rozvoja vlákňitých materiálov v predchádzajúcom období súčasnosti a tendencií VaV môžeme uvažovať o rozvojových smeroch vo svete a u nás: Rozvoj nových vlákňitých materiálov na báze domácich obnoviteľných surovín pre rozvoj biodegradovateľných vlákňitých materiálov z biopolymérov, najmä mikrobiálnych typov. Optimalizácia procesov prípravy vlákňitých



materiálov s cieľom zníženia energetickej náročnosti a minimalizácie odpadov a možnosť recyklácie.

- [1] Walter L., „Chemiefasern für technische Textilmodule“ Deutsche Fachverlag, Frankfurt am Main 2001
- [2] Jambrich, M., Sroková, I., Starigazda, J., Sýkorová, J., Šiarnik, M.: „The structure and properties of fibre materials on the basis synthetic and poly lactid polymers”  
In: 2. International Material Conference TEXCO 2006.  
17.-18. August 2006 Ružomberok p. 7-12

### MICROWAVE - ASSISTED HYDROPHOBIZATION OF HYDROXYETHYLCELLULOSE

S. MINÍKOVÁ<sup>1</sup>, I. SROKOVÁ<sup>2</sup>, V. SASINKOVÁ<sup>3</sup>,  
A. EBRINGEROVÁ<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Fakulta priemyselných technológií TnUAD, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov

<sup>2</sup>Faculty of Industrial Technologies, University of Alexander Dubček in Trenčín, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov

<sup>3</sup>Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava

<sup>4</sup>Center of Excellence of the Slovak Academy of Sciences, Institute of Chemistry; 845 38 Bratislava, Slovakia

Korešpondenčný autor: [minikova@fpt.tuni.sk](mailto:minikova@fpt.tuni.sk)

Partially hydrophobized HEC derivatives represent important non-ionic polymeric surfactants [1]. The O-(2-hydroxyethyl)cellulose (HEC, DS = 1) was partially hydrophobized in order to prepare polymeric surfactants by the transesterification reaction using the methyl ester of rape seed oil (MERO), the methyl laurate (MELA) and the triacyl glycerides (TAG, rape seed oil) with or without catalyst at various reaction conditions in system H<sub>2</sub>O/DMF using microwave irradiation. The hydrophobization was performed by the assistance of microwave energy analogical as described by the preparation of cellulose stearate [2]. The transesterification reaction of hydroxyethylcellulose with TAG was carried out similarly as described Aburto et al. by the transesterification reaction between TAG and amylose [3]. The prepared esters of hydroxyethylcellulose were characterized by FTIR spectroscopy. The surface-active properties were determined by surface tension, emulsifying efficiency and foamability. The polymeric surfactant performance of the water-soluble esters were tested by washing power and antiredeposition efficiency. The viscometric properties of their aqueous solutions and unmodified HEC were investigated in dilute range. The viscosities decreased due to the concentration of the HEC derivatives by intramolecular interactions. The results suggested the partially hydrophobized esters of hydroxyethylcellulose are potential

non-ionic biosurfactants, which might be exploited in various industrial applications. Moreover, application of microwave energy might contribute to a more economic process due to substantial shortening of reaction time.

*This work was financially supported by the Slovak Grant Agency VEGA, grant No. 2/6131/26, CUGA 3/2006 and CUGA 4/2006.*

- [1] Sroková, I., Miníková, S., Ebringerová, A., Sasinková, V., Heinze, T.: *Tenside Surf. Det.* 40 (2003) 73 - 76.
- [2] Antova, G., Vasvasova, P., Zlatonov, M.: *Carbohydr. Polym.* 57 (2004) 131 - 134.
- [3] Aburto, J., Alric, I., Borredon, E.: *Starch/Stärke* 57 (2005) 145 - 152

### MODELLING OF FERROUS CHLORIDE PRODUCTION FOR NEEDS OF ITS IMPROVEMENT AND OPTIMIZATION

V. HANTA<sup>1</sup>, J. POŽIVIL<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Fakulta chemicko-inženýrská, Praha 6, Česká republika

<sup>2</sup>Vysoká škola chemicko-technologická Praha

Korešpondenčný autor: [hantav@vscht.cz](mailto:hantav@vscht.cz)

High-capacity production of heavy chemicals usually runs on continuous production equipment that has been optimized at its design already. On the contrary, production of chemical specialties and pharmaceuticals often runs in a batch way. Batch production lines are built from standardized universal apparatuses. In quest to reduce investment costs, apparatuses that are more expensive often are used repeatedly for different technological operations. Optimization of batch lines is generally more complicated task than optimization of continuous technologies. Tasks of this type - combinatorial optimization - belong from a mathematical standpoint into the class of NP-complete problems that cannot be solved in polynomial time. At building a mathematical model and its optimization, computational difficulties arise related to this feature. Usually only a good sub-optimum, not the optimum, can be achieved. Contrariwise building of a simulation model of a batch line as a discrete event system is simpler than a mathematical model creating. For evaluation of possible alternatives or directly optimization of batch line, a simulation program can be used with advantages. We verified the methodology of modelling and improvement of more complex batch plants by means of a simulation program on an example of ferrous chloride production for pharmaceutical purposes. The technology is not complicated from the chemical standpoint; it is divided into six production stages overall. Some apparatuses were used repeatedly, even in other manufacturing stages. Several

recycles arise in such a way and the production management becomes complicated. Because of this, several alternatives of operation sequencing are possible. Such a sequence of operations can be designed that enables increase of production without extra investment costs. All simulation experiments run on the simulation model that was created in the Witness 2007 program.

*The work has been supported by the fund No MSM 6046137306 of Ministry of Education of the Czech Republic. This support is very gratefully acknowledged.*

- [1] Peredo C. H. et al.: Learning Witness. Lanner Group. Houston, Texas, USA, 1998.
- [2] Robinson S.: Successful Simulation. A Practical Approach to Simulation Projects. McGraw-Hill, London, 1994.

## ŠTRUKTÚRA A VLASTNOSTI VLÁKNITÝCH MATERIÁLOV NA BÁZE POLYPROPYLENOVÝCH A BAMBUSOVÝCH VLÁKIEN

J. BALOGOVÁ<sup>1</sup>, J. VNENČÁKOVÁ<sup>2</sup>, M. JAMBRICH<sup>3</sup>, L. HAJDÚCHOVÁ<sup>4</sup>, E. PAVLÍKOVÁ<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Chemosvit-Fibrochem, a.s., Štúrová 101, 059 21 Svit

<sup>2</sup>Výskumný ústav chemických vlákien a.s., Štúrová 2, 059 21 Svit

<sup>3</sup>Trenčianska univerzita, Fakulta priemyselných technológií, Katedra chémie a technológie polymérov a textilu

<sup>4</sup>Fakulta priemyselných technológií TnUAD, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov

Korešpondenčný autor: [balogova.j@fibrochem.sk](mailto:balogova.j@fibrochem.sk)

V prednáške bude pojednané o príprave, štruktúre a vlastnostiach vláknitých materiálov - pletenín na báze polypropylénových, bavlnených a bambusových vlákien. Táto kombinácia vlákien s rozdielnou štruktúrou, hydrofilnosťou a hydrofóbnosťou umožňuje prípravu širokej škály sortimentov výrobkov so zmenenými fyziologickými a úžitkovými vlastnosťami. Aplikácia PP vlákien v kombinácii s bavlnenými vláknami pre výrobu ponožiek alebo športových textílií dnes predstavuje štandardný produkt. Rovnako i aplikácia bambusových vlákien vo výrobe ponožiek a iných výrobkov v kombinácii s bavlnenými vláknami je v spoločenskom využití. Príprava uvedených výrobkov z kombinácie PP a bambusových vlákien doteraz nebola publikovaná. Bambusové vlákna z hľadiska molekulovej štruktúry môžeme charakterizovať ako polysacharid, resp. polymér na báze celulózy. Vláknité materiály - výrobky sa pripravujú z bambusových vlákien vo forme regenerovanej celulózy podobne ako viskózne vlákna, alebo vo forme netkaných textílií z bambusovej buničiny. Bambus je viacročná rýchlorastúca trávina, ktorá za priaznivých klimatických a pôdnych podmienok narastie až 80 cm/deň. DI-

hobojším sledovaním sa potvrdilo, že bambus obsahuje antibakteriu - bioagent, ktorý sa zachováva vo vláknach i po jeho prechode viacerými procesmi spracovania. Bambusové vlákna majú niektoré rozdiely vlastností v porovnaní s viskóznymi a bavlnenými vláknami i pritom všetkom, že majú rovnaký celulózový základ, čo bolo potvrdené aj našimi experimentálnymi prácami. Naše experimentálne práce boli orientované na prípravu vláknitých materiálov - pletenín pre výrobu ponožiek a iných podobných textílií. Pre ich prípravu sme použili PP vlákna s rôznou jednotkovou jemnosťou (Tdj) 1.0 dtex, 1.7 dtex a 3.5 dtex, bavlnené vlákna s jemnosťou (Tdj) 29.5 dtex a bambusové vlákna s Tdj 29.5 dtex. U pripravených pletenín sme hodnotili makromorfologickú štruktúru, fyzikálne - mechanické, fyziologické (transport tepla a vlhkosti) a úžitkové vlastnosti. Získané výsledky nám umožňujú vysloviť záver, že aplikácia bambusových vlákien v kombinácii s PP vláknami je prínosom k zvýšeniu niektorých úžitkových vlastností pletených výrobkov v porovnaní s výrobkami z PP a bavlnených vlákien. Bambusové vlákna sú perspektívnym surovinovým zdrojom pre výrobu vláknitých materiálov.

*Kolektív autorov ďakuje organizátorom konferencie za možnosť prezentácie ich výsledkov.*

- [1] Murárová, A., Jambrich, M., Murárová, Z.: Fyziológia odievania III. Komfort nosenia. Vlákna a textil 2001, 8 (4)
- [2] Jambrich, M., Murárová, A., Ďžubas, F.: Aspects of the development of cellulose fibers. Vlákna a textil, 2000, 7(4)
- [3] Jambrich, M., Balogová, J., Harďoňová, D.: Štruktúra a vlastnosti textílií na báze PP vlákien s rôznou geometriou, Vlákna a textil, 2006, 13, (3)

## ALTERNATIVNÍ SUROVINY PRO CHEMICKÝ PRŮMYSL A VÝROBU PALIV

J. LEDERER

VÚANCH

Korešpondenčný autor: [Jaromir.Lederer@vuanch.cz](mailto:Jaromir.Lederer@vuanch.cz)

## Prednášky – sekcia 6

## ADHÉZNE A POVRCHOVÉ VLASTNOSTI POLYETYLÉNTEREFTALÁTU MODIFIKOVANÉHO PLAZMOU

I. NOVÁK<sup>1</sup>, M. ŠTEVIAR<sup>1</sup>, I. CHODÁK<sup>1</sup>, I. JANIGOVÁ<sup>1</sup>,  
M. ŠPÍRKOVÁ<sup>2</sup>, M.M. CHEHIMI<sup>3</sup>, O. ŠOLCOVÁ<sup>4</sup>, P. STOPKA<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Ústav polymérov, Slovenská Akadémia Vied, Dúbravská cesta, SK-84236 Bratislava, Slovenská republika

<sup>2</sup>Ústav makromolekulární chemie, Akademie věd České republiky, Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6

<sup>3</sup>ITODYS, Université Paris 7-Denis Diderot 75005 Paris

<sup>4</sup>ÚCHP AV ČR, v.v.i.

<sup>5</sup>Ustav anorganické chemie AV ČR

Korešpondenčný autor: [upolnovi@savba.sk](mailto:upolnovi@savba.sk)

Povrchovou modifikáciou polyetyléntereftalátu (PET) plazmou bariérového výboja pôsobiaceho pri atmosférickom tlaku v prostredí vhodného plynu sa dosiahne zvýšenie hydrofilnosti povrchu polyméru a vzrastie pevnosť adhézných spojov ku polárnejším substrátom (1-3). Dôležitou výhodou povrchovej úpravy polymérov vplyvom plazmy je fakt, že modifikácia povrchu prebieha iba v povrchových vrstvách, bez toho, aby sa zmenili výhodné vlastnosti polyméru v objeme polyméru, pričom hĺbka modifikácie dosahuje hodnotu niekoľkých desiatok nanometrov. Výberom plazmového plynu je možné dosiahnuť požadovanú povrchovú modifikáciu polymérneho povrchu, pričom plazmové plyny môžu modifikovať povrch celého substrátu bez ohľadu na štruktúru a chemickú reaktivitu. Povrchová energia PET po 20 s modifikácie bariérovou plazmou v dusíku vzrástla o 40 % v porovnaní s nemodifikovaným polymérom. Hodnoty disperznej zložky a acido-bázickej zložky povrchovej energie s časom modifikácie PET plazmou bariérového výboja v dusíku rástli. AFM merania ukázali, že reliéf povrchu referenčnej PET vzorky sa počas modifikácie bariérovou plazmou v rôznych plynových zmenil. Pôsobením bariérovej plazmy sa povrch PET fólií najintenzívnejšie zdrsnil po modifikácii v kyslíku a vzduchu, menej zdrsnený povrch PET bol pozorovaný po modifikácii v dusíku.

Slovenskej Grantovej Agentúre VEGA (grant č. 2/7103/27) za podporu výskumu.

- [1] Novák I, Pollák V, Chodák I.: Plasma Processes and Polymers, 3, 2006, 355.
- [2] Novák I, Števiar M, Chodák, I, Krupa I, Nedelčev T, Špírková M, Chehimi M M, Mosnáček J, Kleinová A.: Polymers for Advanced Technologies 18, 2007, 97.
- [3] Ráhel J, Šimor M, Černák M, Štefečka M, Imahori Y, Kando M.: Surf. Coat. Technol. 64, 2003, p.169.

## INOVÁCIA BAKALÁRSKEHO ŠTÚDIA CHÉMIE NA PRIF UK V BRATISLAVE S PRIHLIADNUTÍM NA POŽIADAVKY TRHU PRÁCE

M. SALIŠOVÁ<sup>1</sup>, L. ŽÚRKOVÁ<sup>2</sup>, E. RAKOVSKÝ<sup>3</sup>,  
V. POLÁČKOVÁ<sup>1</sup>, R. ŠEBESTA<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Katedra organickej chémie, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava

<sup>2</sup>Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 84215 Bratislava 4

<sup>3</sup>Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Bratislava

Korešpondenčný autor: [salisova@fns.uniba.sk](mailto:salisova@fns.uniba.sk)

Ako dôsledok boloňského procesu bolo na väčšine univerzít v Európe zavedené trojstupňové vysokoškolské štúdium : 1.stupeň - bakalársky, 2.stupeň - magisterský, 3.stupeň - doktorandský. Je preto potrebné pre bakalárov, ktorí sa rozhodnú vstúpiť do pracovného procesu po ukončení prvého stupňa štúdia, inovovať študijné plány tak, aby sa vo vybranom pracovnom procese čo možno najlepšie uplatnili.

V súvislosti s tým sa na PRIF UK v Bratislave rieši projekt podporovaný z Európskeho sociálneho fondu<sup>1</sup>, zameraný na inováciu študijného programu bakalára chémie podľa požiadaviek trhu práce v Bratislavskom samosprávnom kraji (BSK). Cieľom projektu je informovať širokú verejnosť o tejto forme vysokoškolského štúdia chémie a zistiť u zamestnávateľov požiadavky na odborné aj všeobecné znalosti a laboratórne zručnosti absolventov. Zároveň je potrebné harmonizovať nový študijný program so študijnými programami platnými na európskych univerzitách, čo zabezpečí študentom možnosť štúdia aj na týchto univerzitách a zvýši ich šance zamestnať sa nielen na domácom ale aj európskom trhu práce.

V rámci horeuvedeného projektu sme kontaktovali viac ako 500 potenciálnych zamestnávateľov v BSK, z ktorých takmer 30 prejavilo záujem o spoluprácu. Požiadavky zamestnávateľov sme monitorovali dotazníkovou formou, do ktorej sa zapojilo viac ako 20 podnikov. Výsledky sme diskutovali na seminári pre zástupcov podnikov a učiteľov chémie na PRIF UK v marci 2007. Výsledky monitoringu sme prezentovali aj na Výročnej konferencii „European Chemistry Thematic Network“<sup>2</sup> v San Sebastiane v apríli 2007.

Zo získaných výsledkov vyplýva, že okrem odborných a jazykových vedomostí a schopností využívať informačné technológie, súčasť trhu práce vyžaduje od absolventa aj základné znalosti z menežmentu podniku, ekonomiky a pracovného práva.

Za finančnú podporu ďakujeme ESF

[1] <http://bakalarchemie.fns.uniba.sk/archiv.html>

[2] <http://ectn-assoc.org>

## THE STRUCTURE AND PROPERTIES OF FIBROUS MATERIALS BASED ON SPECIAL TYPE OF SYNTHETIC AND MICROBIAL FIBRES

E. BENČÍKOVÁ<sup>1</sup>, K. ŠČASNÍKOVÁ<sup>2</sup>, M. JAMBRICH<sup>1</sup>, L. HAJDÚCHOVÁ<sup>2</sup>, M. ŠIARNIK<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Trenčianska univerzita, Fakulta priemyselných technológií, Katedra chémie a technológie polymérov a textilu

<sup>2</sup>Fakulta priemyselných technológií TnUAD, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov

<sup>3</sup>QUILTEX a.s.

Korešpondenčný autor: [bencikova@fpt.tnuni.sk](mailto:bencikova@fpt.tnuni.sk)

The paper deals with the preparation, structure and properties of fibrous materials based

on special types of synthetic and microbial fibres, especially polyester (PES) and polylactide (PLA) fibres. Clothing and habitation are one of the basic social and personal human needs as they offer protection against the caprices of nature (weather) and serve also as a manifestation of personal preferences in terms of type and style of clothes. Housing textiles represent an important part of human habitations. Blankets and pillows also fall within this area.

Nowadays, nasal allergy and asthma are being ranked among the most widespread illnesses. One of the causes of allergic reactions is the presence of dust particles (both inorganic and organic) in the indoor air of home environment. Housing textiles (pillows and blankets) can be a source of such dust particles. One possibility of how to decrease the reproduction and subsequent spreading of allergens in the air is the use of hydrophobic fillings with the thermal-insulating properties similar to natural materials. Synthetic fibres that best meet these criteria are those absorbing only a small amount of moisture and consequently preventing the creation of suitable conditions for microorganisms' growth.

Recently, researches have been focused on microbial polymer systems based on non-toxic natural renewable products. The production of polylactic acid is the one the most explored, but there are also other well-known polymers such as polycaprolacton, polybutylene succinate and poly-3-hydroxybutyrate.

Our experimental work was focused on the preparation of fleeces for housing textiles - blankets and pillows made from special PLA and PET types of fibres. We also evaluated their macromorphological structure, physical-mechanical and physiological properties and other utility properties.

## ÚČINNOST INHIBITORŮ KOROZE ZA PŘÍTOMNOSTI ÚSAD A KOROZNÍCH PRODUKTŮ

J. PETRŮ<sup>1</sup>, P. SAJDL<sup>1</sup>, O. PROKEŠ<sup>2</sup>, M. HUBIČKOVÁ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav energetiky

<sup>2</sup>Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav plynárenství, koksochemie a ochrany ovzduší

Korešpondenčný autor: [jana.petru@vscht.cz](mailto:jana.petru@vscht.cz)

Nejvyšší účinnosti ochrany proti korozi plynovodů se dosahuje zpravidla vhodnou kombinací různých ochranných způsobů (např. katodická ochrana, izolace potrubí, použití vhodných korozních inhibitorů, ...). K zabezpečení spolehlivého provozu plynovodů a minimalizaci havarijních stavů může výrazně napomoci sledování stavu potrubí poškozených korozi a předcházení korozním procesům v plynovodech účinnou ochranou korozními inhibitory.

Prezentovaná práce se zabývá testováním a porovnáním účinnosti inhibitorů za přítomnosti úsad a korozních produktů elektrochemickou metodou - měřením polarizačních křivek (program Gamry instruments, software Framework 4/0). Elektrody tvořené ocelovým válečkem třídy 11 (ČSN 411373), ze které jsou konstruovány potrubní systémy plynovodů, byly vystaveny koroznímu prostředí s obsahem uhlovodíkových kondenzátů a s nízkým obsahem kyslíku. Po vytvoření korozní vrstvy byly aplikovány korozní inhibitory (3-(2-Imidazolin-1-yl)-propyl-triethoxysilan, T8081E, T8829E, T440E) a dlouhodobě měřen korozní proud. Následně byly vy počítány jejich účinnosti, které byly porovnány s předchozími experimenty z prostředí bez přítomnosti korozních produktů. Dále byl studován vliv délky expozice elektrod v korozním prostředí na účinnost testovaných inhibitorů.

Použité korozní inhibitory vykazují ve většině případů vysokou účinnost a jejich působení bude i nadále studováno.

Práce byla provedena díky finanční podpoře výzkumného záměru MSM CZ 6046137304.

## Prednášky – sekcia 1

### ALKALICKÁ HYDROLÝZA KUMARÍNOV A CHROMÓNOV A KINETICKÉ STANOVENIE ICH ASOCIAČNÝCH KONŠTÁNT S CYKLODEXTRÍNMÍ

J. BENKO<sup>1</sup>, O. VOLLÁROVÁ<sup>1</sup>, M. MATEJDES<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta

<sup>2</sup>Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava

Korešpondenčný autor: benko@fns.uniba.sk

Vyšetrila sa kinetika alkalickéj hydrolyzy metyl 2-oxo-2,5-dihydropyrano[3,2-*c*]chromén-5-karboxylát a jeho derivátov v zmesi voda - dioxán (30:70 %V), kyseliny 2-(7-metoxi-2-oxo-2*H*-chromén-3-yl)octovej, kyseliny 2-(7-(dimetylamo)-2-oxo-2*H*-chromén-3-yl)octovej a kyseliny 2-(3-oxo-3*H*-benzo[*f*]chromén-1-yl)octovej vo vode a v zmesi voda - dioxán. Ide o nové látky, nasyntetizované na Katedre organickej chémie PriFUK<sup>1</sup>. Zo závislosti rýchlostnej konštanty od koncentrácie a  $\beta$ - a  $\gamma$ -cyklodextrínu sa vypočítali príslušné asociačné konštanty kumarínov a chromónov s cyklodextrínmi. V prípade chromónov substituenty podstatne neovplyvnili rýchlosť alkalickéj hydrolyzy látok, v ktorých je fenyl naviazaný na uhlík susediaci s karbonylovou skupinou laktónu prostredníctvom síry. Rýchlosť podstatne klesla, približne o jeden rád, ak namiesto fenylu bol prítomný metyl, alebo fenylová skupina bola naviazaná priamo na tento uhlík (metyl 2-oxo-3-fenyl-2,5-dihydropyrano[3,2-*c*]chromén-5-karboxylát a 3-metyl-5-propionylpyrano[3,2-*c*]chromén-2(5*H*)-ón). Pre metyl 2-oxo-3-(fenyloxy)-2,5-dihydropyrano[3,2-*c*]chromén-5-karboxylát sa pozorovalo zvýšenie rýchlostnej konštanty viac ako o jeden rád oproti ostatným vzorkám. V tejto zlúčenine je fenylová skupina naviazaná na zvyšok molekuly oxónu prostredníctvom kyslíka. Štruktúra tejto látky umožňuje stabilizáciu aktívovaného komplexu vnútromolekulovou vodíkovou väzbou.<sup>2</sup> Podrobnejšie sa vyšetrila závislosť rýchlostnej konštanty od koncentrácie dioxánu pre metyl 2-oxo-2,5-dihydropyrano[3,2-*c*]chromén-5-karboxylát, kyseliny 2-(7-metoxi-2-oxo-2*H*-chromén-3-yl)octovej, kyseliny 2-(7-(dimetylamo)-2-oxo-2*H*-chromén-3-yl)octovej a kyseliny 2-(3-oxo-3*H*-benzo[*f*]chromén-1-yl)octovej. Ukázalo sa, že jednoduché elektrostatické interakcie nemajú rozhodujúci vplyv na rýchlosť alkalickéj hydrolyzy chromónov a kumarínov. Všetky vyšetrované látky tvorili najstabilnejšie asociáty s  $\beta$ -cyklodextrínom, najslabšie s cyklodextrínom. Stabilita inkluzívneho komplexu klesala s rastúcou koncentráciou vody. Pokles asociatívnej konštanty v prostrediach bohatých na vodu môže byť pravdepodobne spôsobený hydrataciou kyslíkov v molekule chromónu alebo kumarínu. Rýchlostná konštantá pre alkalickú hydrolyzu kumarínu resp. oxónu  $k$  0. To znamená, že tieto látky sú v inkluzívnom komplexe s cyklodextrínmi dobre chránené voči hydrolyze.

Práca je financovaná z prostriedkov úlohy APVT-20-029804

- [1] M. Lácová, A. Boháč, Proprietary application 2006, No. PP5006 - 2006.
- [2] J. Benko, V. Holba, Collection Czech. Chem. Commun. 45, 1485 (1980).

## MALONDIALDEHYD JAKO MARKER PRO STANOVENÍ POŠKOZENÍ JEDLÝCH OLEJŮ LIPOPEROXIGENACÍ

V. PIVEC, M. ŠULC

Česká zemědělská univerzita Praha, Fakulta agrobiologie, potravinových a přírodních zdrojů, Katedra chemie

Korešpondenčný autor: pivecv@af.czu.cz

## INTERAKCIE GLYKOLOV S HYDROFILNÝMI A HYDROFÓBNÝMI IÓNNAMI V ZMESIACH VODA - GLYKOLY

O. VOLLÁROVÁ<sup>1</sup>, J. BENKO<sup>1</sup>, M. JAVOROVÁ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta

<sup>2</sup>Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava

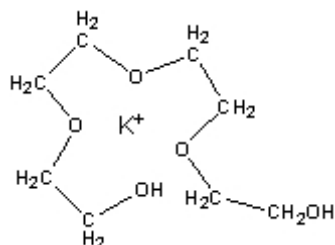
Korešpondenčný autor: vollarova@fns.uniba.sk

Študoval sa vplyv prostredia na chovanie iónov  $K^+$ ,  $Cs^+$  a  $Ba^{2+}$  a komplexných iónov  $[Co(bipy)_3]^{2+}$  a  $[Co(bipy)_3]^{3+}$  v zmesnom vodno - nevodnom prostredí. Nevodnú zložku tvorili glykoly homologického radu  $HO(CH_2CH_2O)_nH$ ,  $n=1-4$ . Z rozpustností pikrátových solí sa stanovili prenosové Gibbsove energie,  $D_t G^0$ , študovaných zlúčenín. Iónové príspevky  $D_t G^0$  sa získali na základe TATB predpokladu. Pre referenčný elektrolyt  $Ph_4PBPh_4$  sa stanovili iónové  $D_t G^0$  v glykoloch  $n=2-4$ . Pre ióny  $K^+$  a  $Cs^+$  rástla miera stabilizácie s počtom etoxy skupín v molekule kosolventa. Navrhla sa pravdepodobná štruktúra komplexu  $K^+ \dots TTEG$ .  $Ba^{2+}$  je, na rozdiel od  $K^+$  a  $Cs^+$ , destabilizovaný, čo poukazuje na preferenčnú solvataciu vodou, ktorá narastá s počtom etoxy skupín  $n=2-4$ . Tento výsledok koreluje s hodnotami hydratačných entalpií  $D H^o(K^+) = -330$  a  $D H^o(Ba^{2+}) = -1330$  kJ/mol<sup>1</sup>. Pre hydrofóbne ióny  $Ph_4P^+$ ,  $[Co(bipy)_3]^{2+}$  a  $[Co(bipy)_3]^{3+}$  sa zistilo, že stabilizácia v zmesnom prostredí EG a DEG narastá s klesajúcim nábojom hydrofóbného iónu, čo poukazuje na možnú stabilizáciu prostredníctvom hydrofóbných interakcií s hydrofóbnou časťou kosolventa - amfifilu. Pre oba komplexné ióny narastala stabilizácia s počtom etoxy skupín v molekule glykolu. Hypsochromatický posun polohy ligandového pásu bipyridilu ( $D_l = 7$  nm) v zmesnom prostredí voda glykol ( $n=3,4$ ) pre  $x_{kosol} = 0.8$  v porovnaní s vodným roztokom sa pozoroval len v prípade  $[Co(bipy)_3]^{2+}$ , čo kvalitatívne korešponduje so stabilizáciou komplexného iónu pozorovanou prostredníctvom  $D_t G^0$ .

Najvýraznejšie zmeny  $D_t G^0$  pre všetky študované ióny sa pozorovali v oblasti bohatej na vodu, kde sa predpokladá hydrofóbná agregácia molekúl vody okolo molekúl kosolventa, narušenie agregátov amfifilu a možné interakcie medzi nerovnakými molekulami rozpúšťadla v zmesnom prostredí.<sup>2</sup>

Práca je financovaná z prostriedkov : APVT-20-029804 a VEGA 07-124-00

- [1] Y. Marcus, *Biophys. Chem.* 51, 1994, 111  
 [2] M. M. Deshmukh, N. V. Sastry, S. R. Gadre, J. *Chem. Phys.* 121, 2004 12402



Predpokladaná štruktúra komplexu K+...TTEG

### SPECTROFLUORIMETRIC ANALYSIS OF THE BINDING OF MITOCHONDRIAL TELOMERE-BINDING PROTEIN TO TELOMERIC OLIGONUCLEOTIDE

E. SMREKOVA<sup>1</sup>, M. ŠEBESTA<sup>2</sup>, J. NOSEK<sup>3</sup>, Ľ. TOMÁŠKA<sup>4</sup>, I. VALENT<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Bratislava

<sup>2</sup>Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Katedra biochémie, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava

<sup>3</sup>Department of Biochemistry, Comenius University, Faculty of Natural Sciences, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava

<sup>4</sup>Department of Genetics, Comenius University, Faculty of Natural Sciences, Mlynská dolina B-1, 842 15 Bratislava

<sup>5</sup>Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava

Korešpondenčný autor: gorkanna@yahoo.com

The execution of genetic instructions encoded by DNA is dependent on additional cellular components including a number of proteins regulating its higher-order structure, accessibility to DNA modifying complexes and factors involved in gene expression. Mitochondrial telomere binding protein (mtTBP) was shown to interact with a single-stranded DNA and to exhibit a preference to a 5' single-stranded telomeric overhang of the linear mitochondrial DNA (mtDNA) of the yeast *Candida parapsilosis* [1,2]. To characterize the DNA-binding properties of mtTBP in more detail, we investigated interaction of the wild type mtTBP and two mutant versions (mtTBP<sup>G28E</sup> and mtTBP<sup>W61L</sup>) with the last 51 nucleotides (TEL51) of the 5' telomeric overhang of *C. parapsilosis* mtDNA. Binding of the DNA to the proteins was monitored by fluorescence quenching due to a stacking interaction of the tryptophan (Trp) residue with the DNA helix [3] using FloroLog FL3-11 and Shimadzu RF-5301 PC. There

was a 30-45 % fluorescence intensity decrease of the Trp emission maximum at 343 nm after 60 min incubation at a ratio [DNA]/[mtTBP] = 0.6 for the wild type or the G28E mutant in concentration of  $3 \times 10^{-7}$  M. The W61L mutant containing only one of the two Trp residues did not exhibit the fluorescence quenching. In contrast to HEPES, PBS buffer caused a shift of the emission maxima demonstrating the importance of selection of a proper buffer solution for the fluorescence measurements. Future experiments will be aimed at determination of the association constants and description interaction kinetics under various conditions.

This work was supported by the Howard Hughes Medical Institute grant (55005622), the Fogarty International Research Collaboration Award (2-R03-TW005654-04A1), the Slovak grant agencies VEGA (1/2331/05, 1/3247/06) and APVT (20-001604, LPP-0164-06).

- [1] Tomaska et al. *J Biol Chem.* 1997, 272(5):3049-3056.  
 [2] Nosek et al. *J Biol Chem.* 1999, 274(13):8850-8857.  
 [3] Khamis et al. *J Biol Chem.* 1987, 262(23):10938-10945.

### JEDNOKROKOVÁ APROXIMÁCIA V CHEMICKEJ KINETIKE

P. ŠIMON

FCHPT STU Bratislava

Korešpondenčný autor: peter.simon@stuba.sk

## Prednášky – sekcia 2

### FOTOKATALYTICKÁ DEGRADACE ORANŽE II NA ČÁSTICOVÝCH VRSTVÁCH PŘIPRAVENÝCH Z RŮZNÝCH PRÁŠKOVÝCH FOTOKATALYZÁTORŮ

M. ZLÁMAL<sup>1</sup>, J. KRÝSA<sup>2</sup>, J. JIRKOVSKÝ<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav anorganické technologie

<sup>2</sup>Vysoká škola chemicko-technologická Praha

<sup>3</sup>Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., Dolejškova 3, 182 23 Praha 8

Korešpondenčný autor: zlamalm@vscht.cz

Vrstvy připravené z práškového oxidu titaničitého v sobě kombinují dvě výhody heterogenní katalýzy, a to vysoký specifický povrch a imobilizaci fotokatalyzátoru. Práce

se zabývá přípravou částicových vrstev a stanovením jejich fotokatalytické aktivity. Pro přípravu vrstev byly zvoleny tři různé práškové fotokatalyzátory (P25 (Degussa), a anatas Ti1 a Ti2) a tři různé techniky přípravy (sedimentace, elektroforéza a dip-coating).

Fotokatalytická aktivita připravených vrstev byla zjišťována pomocí fotokatalytické degradace modelové látky Oranže II (2-hydroxy-1-naphtylazo benzensulfonan sodný) ve vodném roztoku. Toto azo-barvivo má absorpční maximum ve viditelné oblasti spektra (485 nm) a minimum v oblasti 350 nm odpovídá oblasti maximální emise použitého zdroje UV záření. Tak je pouze malá část záření pohlcena roztokem, přičemž většina je využita k iniciaci fotokatalytického děje.

Fotokatalytická aktivita připravených vrstev byla srovnána s fotokatalytickou aktivitou suspenzí jednotlivých materiálů. V případě materiálu Ti2 došlo k využití jeho vysokého specifického povrchu až po úpravě suspenze ultrazvukem, který rozbil aglomeráty. Zatímco množství a typ nanoseného fotokatalyzátoru má velký vliv na fotokatalytickou aktivitu vrstvy, metoda přípravy nemá žádný efekt.

Rychlost fotokatalytické degradace Oranže II byla při pH 3 a 7 téměř stejná, ale při pH 10 byla rychlost podstatně nižší. Přídavek methanolu k roztoku Oranže II měl v kyselé oblasti nepatrný vliv na rychlost její degradace v důsledku silné adsorpce aniontového barviva na protonovaný, kladně nabitý povrch oxidu titaničitého. V alkalické oblasti došlo v důsledku přídavku methanolu k poklesu rychlosti fotokatalytické degradace, avšak pouze pouze o 60%, což svědčí o tom, že i v této oblasti pH je významným dějem přímá oxidace barviva.

*Autoři děkují za finanční podporu Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (projekt IM0577).*

## ČISTOTA A CHEMIE PAROVODNÍCH ENERGETICKÝCH OKRUHŮ

I. JIRÍČEK<sup>1</sup>, L. DIBLÍKOVÁ<sup>1</sup>, M. KOLOVRATNÍK<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ústav Energetiky, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 16628 Praha 6

<sup>2</sup>Ústav mechaniky tekutin a energetiky, Fakulta strojní, ČVUT Praha

Korešpondenční autor: Ivo.Jiricek@vscht.cz

Více než 90% elektrické energie v síti České republiky se vyrábí v generátorech poháněných parními turbínami. Zásadní vliv na výkon a spolehlivost provozu parních turbín má čistota napájecí vody sloužící jako zdroj páry. Kontaminace páry během provozu je způsobena chemickým transportem (všechny látky jsou více či méně rozpustné v páře) a mechanickým transportem (kapky s rozpuštěnými solemi jsou transportovány do turbíny). Přehřátím páry dochází k následným reakcím jako je hydrolyza solí a termolýza organických látek. Při provozu s kontaminanty v napájecí vodě se vytváří nánosy nečistot v parních částech vedoucí od sníženého výkonu až k poruchám a neplánovaným odstávkám citlivých zařízení jako je parní turbína.

V příkladové studii jsou dlouhodobě cíleně sledovány dva provozy: vysokotlaký parovodní oběh Elektrárny Počerady, ČEZ, a.s. a nízkotlaká Parní výtopna Juliska, Pražská energetika, a.s.. Porovnávány jsou charakteristické online parametry a analýzy odběrů kondenzátu (IC, ICP OES analýza) a nánosů (RFA, RDA analýza). Nánosy odebírané z jednotlivých lopatkových řad vykazují charakteristické koncentrační profily v závislosti na teplotě expandované páry, Obr. 1.

Práce se dále zabývá srovnáním současně platných norem ČSN 077401 a 077403 s normami či doporučeními od zahraničních subjektů (EPRI, ASME a VGB). Bylo zjištěno, že české normy dobře kopírují maximální přípustné obsahy sledovaných nečistot jako jsou křemík, sodík, chloridy, vodivost pro nízké tlaky. Se zvyšováním tlaku se hodnoty přípustných obsahů zvláště u některých parametrů stále více rozcházejí.

*Práce vznikla za částečné podpory VZ MSM CZ 6046137304*

## RADIAČNÍ ODSTRAŇOVÁNÍ Co(II) A Ni(II) Z VODNÝCH ROZTOKŮ

P. KOVAŘÍK<sup>1</sup>, M. POSPÍŠIL<sup>2</sup>, V. ČUBA<sup>3</sup>, B. DRTINOVÁ<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Ústav jaderného výzkumu Řež a.s.

<sup>2</sup>ČVUT v Praze, Fakulta Jaderná a Fyzikálně Inženýrská, Břehová 7, Praha 1

<sup>3</sup>ČVUT v Praze, Centrum pro Radiochemii a Radiační Chemii, Břehová 7, Praha 1

<sup>4</sup>ČVUT v Praze, Fakulta Jaderná a Fyzikálně Inženýrská, Břehová 7, Praha 1

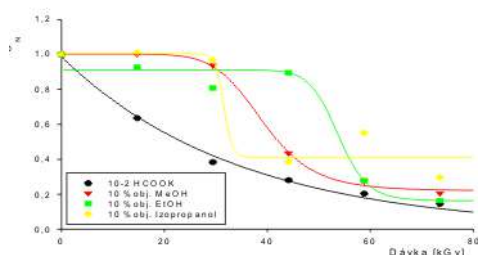
Korešpondenční autor: kvr@ujv.cz

Kobalt a nikel patrí medzi toxické ťžké kovy, nebezpečné pro zdraví člověka a životní prostředí. Studium jejich odstraňování z vod je proto důležité věnovat pozornost. Jako jeden z možných způsobů se jeví použití ionizujícího záření.

V této práci byly k experimentům používány vodné roztoky  $\text{Co}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  a  $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  o koncentracích kovových iontů v rozsahu 10 - 200 mg/l. Pro studium vlivu různých vychytávačů OH radikálů byly do roztoku přidávány  $\text{HCOOK}(\text{Na})$  a některé alifatické alkoholy. Byl také studován vliv pH a přítomnost plynů. Připravené roztoky byly zataveny do tenkostěnných skleněných ampulí a ozařovány na vysokofrekvenčním lineárním urychlovači elektronů LINAC 4-1200 o energii elektronů 4,5 MeV. Dávky záření se pohybovaly v intervalu 0 - 120 kGy.

Bylo zjištěno, že radiační odstranění kobaltných a nikelných iontů probíhá jen za přítomnosti vychytávačů OH radikálů; účinnost je závislá na dávce a použitím vychytávači (obr. 1). Mimo jiné bylo zjištěno, že se nemusí jednat o proces redukční, ale že se uplatňují také procesy srážecí.

Tato práce je realizována na základě výzkumného záměru MSM č. 6840770040.



1. Závislost normované koncentrace (podíl počáteční koncentrace ku aktuální koncentraci v roztoku)  $c_N$  na dávce pro systémy obsahující  $\text{Co}^{2+}$  o počáteční koncentraci 100 mg/l ( $1,7 \cdot 10^{-3}$  mol/l), porovnání účinnosti vychytávačů.

### MODIFIKOVANÉ ALUMINOSILIKÁTY JAKO SELEKTIVNÍ SORBENTY OXOANIONTŮ Z VODNÝCH SYSTÉMŮ

B. DOUŠOVÁ<sup>1</sup>, L. FUITOVÁ<sup>1</sup>, L. HERZOGOVÁ<sup>1</sup>, D. KOLOUŠEK<sup>1</sup>, T. GRYGAR<sup>2</sup>, V. MACHOVIČ<sup>3</sup>

<sup>1</sup>VŠCHT Praha, Ústav chemie pevných látek, Technická 5, 166 28 Praha 6

<sup>2</sup>ÚACH AV ČR, v.v.i., 250 68 Řež

<sup>3</sup>VŠCHT Praha, Laboratoř molekulové spektroskopie, Technická 5, 166 28 Praha 6

Korešpondenční autor: Barbora.Dousova@vscht.cz

Hydratované povrchy aluminosilikátů patří k účinným sorbentům v přírodních i technologických procesech, díky nízkým hodnotám pH nulového náboje však nejsou selektivními sorbenty kontaminantů aniontové povahy. Vzhledem k příznivým vlastnostem a ceně těchto materiálů se objevují snahy upravit jejich povrch tak, aby se zvýšila sorpční kapacita vůči toxickým oxoaniontům. Tento příspěvek přináší výsledky modifikace povrchu několika typů druhořadých nebo odpadních aluminosilikátů (kaolín, klinoptilolitový tuf, bentonit, syntetický zeolit) ionty  $\text{Fe}^{2+}$ ,  $\text{Fe}^{3+}$ ,  $\text{Al}^{3+}$  a  $\text{Mn}^{2+}$ , a následné adsorpce oxoaniontů  $\text{As}^{\text{III}}$ ,  $\text{As}^{\text{V}}$ , resp.  $\text{Se}^{\text{IV}}$  a  $\text{Se}^{\text{VI}}$ . Ukazuje se, že oxoanionty  $\text{As}^{\text{V}}$  a  $\text{Se}^{\text{IV}}$ , které se váží k povrchu pevné fáze formou vnitřních komplexů, se efektivně sorbují na všechny modifikované materiály (účinnost sorpce se zvýšila z < 10 % na 90 - 99 %), bez ohledu na zvolenou úpravu. Pro oxoanionty anionty  $\text{As}^{\text{III}}$ , resp.  $\text{Se}^{\text{VI}}$ , u kterých převládá méně stabilní povrchová vazba vnějšími komplexy, jsou vhodnější strukturně bohatší aluminosilikáty (bentonit, zeolity), jako neefektivnější se ukazuje úprava Al (účinnost » 88 - 95 %). Na vhodnou úpravu sorbentu pro následnou adsorpci oxoaniontu má vliv: složení původního materiálu, pH nulového náboje na povrchu upraveného sorbentu vzhledem k pH sorpčního roztoku, oblast Eh-pH stability sorbovaného iontu a jeho předpokládaná vazba k povrchu pevné fáze.

Práce byla podpořena VZ MŠMT ČR č. 6046137302 a projektem GA AVČR č.A401250701.

- [1] Doušová, B.; Koloušek, D.; Kovanda, F.; Machovič, V.; Novotná, M. 2005. Removal of As(V) Species from Extremely Contaminated Mining Water. *Applied Clay Science* 28 (1-4): 31-43.
- [2] Doušová, B., Grygar, T., Martaus, A., Fuitová, L., Koloušek, D. & Machovič, V. 2006. Sorption of AsV on aluminosilicates treated with FeII nanoparticles. *J. Colloid Interface Sci.* 302: 424-431.
- [3] Sherman, D.M. & Randall, S.R. 2003. Surface complexation of arsenic(V) to iron(III) (hydr)oxides: Structural mechanism from ab initio molecular geometries and EXAFS spectroscopy. *Geochim. Cosmochim. Acta* 67 (22): 4223-4230.

### THE COORDINATION COMPOUNDS OF SODIUM AND CRYSTAL STRUCTURE OF POLYMERIC $\{\text{Na}(\text{M}-\text{OH})_2(\text{MALEINATE}-\text{O})(\text{H}_2\text{O})\}_n$

M. KOMAN<sup>1</sup>, J. MAROSZOVÁ<sup>2</sup>, M. PAJTÁŠOVÁ<sup>3</sup>, M. MELNÍK<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Fakulta chemickej a potravinárskej chémie STU Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava

<sup>2</sup>Department of Inorganic Chemistry, Slovak Technical University, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia



<sup>3</sup>Fakulta priemyselných technológií TnUAD, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov

<sup>4</sup>STU, FCHPT Oddelenie anorganickej chémie

Korešpondenčný autor: marian.koman@stuba.sk

Sodium is very important bio-element and even small deviations from normal level in man are recognized as symptoms of malfunction or disease. The interaction of the sodium ion, which plays a vital role in a number of quite differential processes with bio-molecules, as well as with drugs administered for therapeutic reasons is of considerable interest [1, 2]. One of such sodium bio-complex is vitamin K<sub>3</sub> with thiosemicarbazone. An octahedral arrangement about Na(I) atom created by five molecules of water with the mean Na-O bond distance of 2.419 Å (range from 2.406(2) to 2.453(1) Å) and the sixth position is occupied by H<sub>2</sub>O ligand (Na-O = 2.307(1) Å).

The crystal and molecular structure of polymeric Na(maleinate)(H<sub>2</sub>O)<sub>3</sub> has been determined by X-ray crystallography at ambient temperature. The white complex crystallizes in triclinic system, space group P-1., with lattice parameters  $a = 5.954(1)$  Å,  $b = 6.398(1)$  Å,  $c = 11.250(2)$  Å,  $\alpha = 104.18(3)^\circ$ ,  $\beta = 91.56(3)^\circ$ ,  $\gamma = 100.22(3)^\circ$  and  $Z = 2$  at 293(2) K. The coordination geometry about each Na(I) atom is approximately octahedral formed by five oxygen atoms of water molecules and one oxygen atom of maleinate monoanion. Two pairs of O atoms of water molecules serve as double bridges Na(I) atoms and forming an infinite chain running along the  $a$  axis (Fig. 1). The mean Na...Na separation of 3.49 Å excluded direct bond. There are either two - dimensional hydrogen bonding networks which are discussed.

The authors wish to thank the Slovak Ministry of Education (VEGA project 1/4454/07) for financial support.

- [1] A.G.Guyton, Textbook of medical physiology, W.B. Saundies, Philadelphia (7th edn.), 1986
- [2] W.D.Stein, J.Teor.Biol., 147 (1990) 145; R.J.P.Williams, Quar.Rev.of the Chem.Sor., London, 24 (1970)331

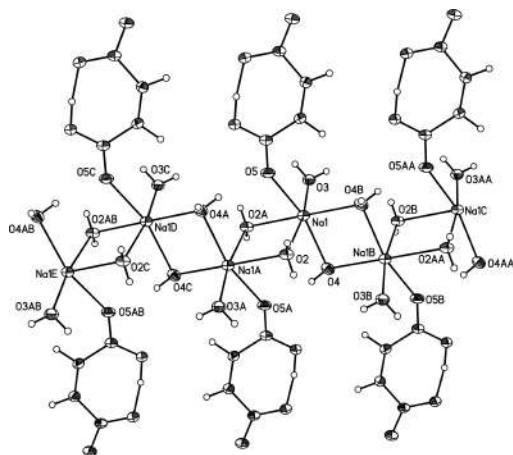


Figure 1. The crystal structure of Na(mal)(H<sub>2</sub>O)<sub>3</sub>.

## Prednášky – sekcia 3

### AMFIFILNÍ FLAVINIOVÉ SOLI JAKO KATALYZÁTORY OXIDACE SULFIDŮ V MICELÁRNÍM PROSTŘEDÍ

R. CIBULKA<sup>1</sup>, L. BAXOVÁ<sup>1</sup>, S. SAYIN<sup>2</sup>, F. HAMPL<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vysoká škola chemicko-technologická Praha

<sup>2</sup>Afyonkarahisarkocatepe University

Korešpondenčný autor: cibulka@vscht.cz

Systémy využívající peroxid vodíku v přítomnosti katalytického množství flaviniových solí 1 a 2 představují účinný prostředek pro chemoselektivní oxidaci sulfidů na sulfoxidy, terciárních aminů na N-oxidy nebo pro Baeyer-Villigerovy oxidace<sup>1</sup>. Podstatou katalytického působení flaviniových solí při oxidacích peroxidem vodíku je tvorba flavin-4a-hydroperoxidu 1-OOH resp. 2-OOH (schéma 1), který je silnějším oxidačním činidlem v porovnání se samotným peroxidem vodíku. Vedle reakce probíhající prostřednictvím flavin-4a-hydroperoxidu (katalyzovaná reakce) dochází v uvedených systémech k oxidaci substrátu samotným peroxidem vodíku (nekatalyzovaná reakce). Významnější příspěvek nekatalyzované reakce je nevýhodný v případě enantioselektivních oxidací prováděných účinkem chirálních flaviniových solí, neboť oxidace probíhající peroxidem vodíku bez účasti flaviniové soli nemůže být stereoselektivní. Proto je důležité nalezení katalytického systému, který by vykazoval co největší rozdíl v rychlosti katalyzované a nekatalyzované oxidace. Zjistili jsme<sup>2</sup>, že v případě amfifilních isoalloxaziniových solí 1 (R<sub>1</sub> = R<sub>3</sub> = R<sub>4</sub> = CH<sub>3</sub>, R<sub>2</sub>=C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>, R<sub>5</sub>=C<sub>12</sub>H<sub>25</sub>) solubilizovaných v micelárním prostředí je výrazně upřednostňována katalyzovaná oxidace thioanisolu před nekatalyzovanou reakcí v porovnání s analogickou reakcí prováděnou v homogenním prostředí za katalýzy homologickou solí 1 (R<sub>1</sub> = R<sub>3</sub> = R<sub>4</sub> = R<sub>5</sub> = CH<sub>3</sub>, R<sub>2</sub>=C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>). Tento nadějný výsledek nás vedl k dalšímu studiu oxidací katalyzovaných flaviniovými solemi prováděných v micelárním prostředí. S využitím amfifilních isoalloxaziniových solí 1 a alloxaziniových solí 2 jsme testovali vliv polohy lipofilního alkylového řetězce, vliv struktury heteroaromatického seskupení (isoalloxaziniové u látek 1 vs alloxaziniové u látek 2) a vliv typu micelárního prostředí na reaktivitu flaviniových solí při oxidaci sulfidů.

Autoři děkují Grantové agentuře České republiky za finanční podporu projektu č. 203/07/1246.

- [1] J.-E. Bäckvall: v knize Modern Oxidation Methods (J. -E. Bäckvall, Ed.), Wiley-VCH Verlag, Weinheim 2004, str. 193 - 222.

[2] R. Cibulka, F. Hampl, L. Marková, E. Svobodová: 12th Blue Danube Symposium on Heterocyclic Chemistry, Tihany, Maďarsko 2007.

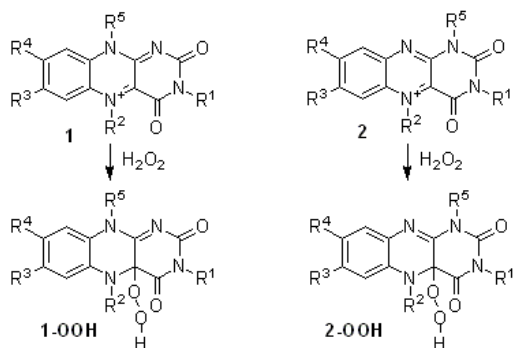


Schéma 1

### CHEMISTRY OF 8-HOMOBRENDANE, 2-HOMOBRENDANE AND PROTOADAMANTANE

M. KRÍŽ

SYNKOLA s.r.o

Korešpondenčný autor: [miro.kriz@post.sk](mailto:miro.kriz@post.sk)

8-homobrendane, according the IUPAC nomenclature, tricyclo[4.3.1.03,7] decane, in old literature also called as isotwistane, or octahydro-1, 5-methano-1H-indane, is belonging to the group of hydrocarbons with common formula C<sub>10</sub>H<sub>16</sub>. Tricyclic system in this case is build only by five and six membered rings. These hydrocarbons are called hydrocarbons from “Adamantane Land”. To this land also belong protoadamantane and 2-homobrendane and next hydrocarbons. In our presentation we interest about the chemistry, H and C NMR description of chemical shifts and the rearrangement of prepared corresponding alcohols. The chemical shifts of 8-homobrendane and 2-homobrendane are not described in the literature in <sup>1</sup>H-NMR or <sup>13</sup>C-NMR spectra. Our work was concentrated upon assignment of all protons and carbons on 8-homobrendane and 2-homobrendane skeleton. These problems were applied for solving of 1D and 2D <sup>1</sup>H-NMR and <sup>13</sup>C-NMR methods. Deuterium labelled 8- and 2-homobrendane skeleton was utilized for controversial protons. Chemical shifts of protons and carbons were determined from 2D {<sup>1</sup>H,<sup>13</sup>C} a 2D {<sup>1</sup>H,<sup>1</sup>H} COSY experiments. (Fig.1)

[1] Part of this contribution was also published in the proceedings at the Meeting Czech and Slovak Chemical Societies, Nitra 1999, Slovakia

### METODY VÝROBY CYKLOHEXANKARBONITRILU VE SHODĚ S PRINCIPY ŠETRNÉ ZELENEJ CHEMIE

P. PAZDERA<sup>1</sup>, J. ŠIMBERA<sup>1</sup>, J. BĚLUŠA<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Masarykova univerzita, Přírodovědecká fakulta, Ústav chemie, Centrum pro syntézy za udržitelných podmínek a jejich management

<sup>2</sup>Centrum pro syntézy za udržitelných podmínek a jejich management, Lučební závody Draslovka a.s. Kolín

Korešpondenčný autor: [pazdera@hemi.muni.cz](mailto:pazdera@hemi.muni.cz)

Cyklohexankarbonitril je významným meziproductem pro farmaceutickú výrobu některých léčiv.

Jeho příprava, resp. výroba v odpovídajícím výtěžku a čistotě není tak jednoduchá, jak by se mohlo na první pohled zdát, o čemž svědčí více než 100 původních prací a patentů.

Cyklohexankarbonitril je buď přístupný několikastupňovými syntetickými procesy s vysokou ekonomickou i ekologickou zátěží, nebo v jednom syntetickém stupni radikálovou reakcí cyklohexanu s chlorkyanem, kyanovodíkem nebo tetraethylamonium kyanidem, kdy vznikají směsi produktů a celý proces je vedle velkého množství odpadů zatížen celou řadou dalších rizik.

Katalytická hydrogenace benzonitrilu, cyklohex-2-enkarbonitrilu apod. sice poskytuje cílový produkt ve velmi vysokém výtěžku, ale doprovodné nečistoty - cyklohexenkarbonitrily, resp. cyklohexadienkarbonitrily jsou komplikovaně oddělitelné a doprovázejí cyklohexankarbonitril v dalších farmaceutických syntézách až do finálního léčiva, kde vzniklé nečistoty vykazují negativní farmakologické účinky. Podobné nevýhody dává také katalytická hydrokyanace cyklohexenu.

Nukleofilní substituce halogenu nebo jiné odstupující skupiny v cyklohexanu také poskytuje cílový produkt, ale jeho výtěžek není významný z důvodu konkurenčních eliminačních nebo následných reakcí.

Naše řešení sice představují několikastupňový proces, ale jejich design je z hlediska provedení realizován jako one-pot, resp. domino proces s unifikací rozpouštědla, recyklací pomocných látek a vedlejších produktů. Riziko použití kyanovodíku jako jedné ze surovin je v organizaci výroby minimalizováno. Řešení poskytují cyklohexankarbonitril ve velmi významném finálním výtěžku a čistotě. Ve zkušebním provozním procesu bylo dosaženo celkového výtěžku více než 90% cyklohexankarbonitrilu (vztaženo na výchozí klíčový derivát cyklohexanu) s čistotou min. 99.5% hlavní složky a složením nečistot plně vyhovujícím požadavkům dalšího odběratele.

Autoři děkují Ministerstvu průmyslu a obchodu České republiky za finanční podporu projektu č. 2A-ITP1/090 „Nové katalyzátory a činidla pro udržitelné zelené syntézy a kombinatoriální syntézy“, který je řešen v rámci „Centra pro syntézy za udržitelných podmínek a jejich management“.

## SYNTÉZA NĚKTERÝCH NOVÝCH BENZO[C]FENANTHRIDINOVÝCH ALKALOIDŮ

J. STÝSKALA, P. CANKAŘ, J. HLAVÁČ

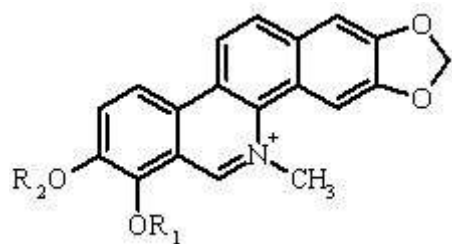
*Katedra organické chemie, PŘF UP v Olomouci, Tř. Svobody 8, 771 46 Olomouc*

Korešpondenční autor: [styskala@prfnw.upol.cz](mailto:styskala@prfnw.upol.cz)

Benzo[c]fenanthridinovým alkaloidům, zvláště těm, které se vyskytují v přírodě v některých rostlinách je neustále věnována velká pozornost. Tyto alkaloidy se vyskytují v rostlinách čeledi Papaveraceae a Rutaceae a byla u nich zjištěna různorodá biologická aktivita. Především však kancerostatická aktivita na řadě nádorových a leukemických liniích. Tento příspěvek se týká syntézy některých nových alkaloidů obsahujících benzo[c]fenanthridinový skelet a jejich deriváty.

*Projekt byl podpořen výzkumným záměrem MSM6198959216*

- [1] Šimánek V., *The Alkaloids*, Academic: New York, 1985; Vol 26



## Prednášky – sekcia 5

### OBTAINING OF ACTIVATED CARBONS FROM RICE HULL ASH

O. ZUFAROV<sup>1</sup>, Š. SCHMIDT<sup>1</sup>, S. SEKRETÁR<sup>1</sup>, Q. SERKAEV<sup>2</sup>,  
L. ZAHRADNÍKOVÁ<sup>1</sup>, L. JANÁČ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav biotechnológie a potravinárstva*

<sup>2</sup>*Tashkent Chemical and Technological Institute*

Korešpondenční autor: [oybek.zufarov@stuba.sk](mailto:oybek.zufarov@stuba.sk)

Activated carbons are adsorbents derived from carbonaceous raw materials in which thermal or chemical methods are used to remove most of the volatile non-carbon constituents and a portion of the original carbon content. Activated carbons can be produced from various raw materials, each of which will provide some differences in physical and adsorptive properties of the finished product.

The most widely used materials in the commercial manufacture of activated carbons are: wood, coconut shells, peat, lignite, bituminous and anthracite coals, petroleum cokes and synthetic polymers (Stephens Douglas, 2000). Some attempts have been made to produce activated carbons of commercial grade from agricultural wastes including rice hull ash. Activated carbons prepared from rice hull ash were used for bleaching soybean oil. These adsorbent decreased color of oil and amount of phospholipids (Proctor A., Clark P.C, 1995). In addition to FFA were adsorbed on activated carbons obtained from rice hull ash (Proctor A.,1990).

There are different ways of obtaining activated carbons from rice hull ash. The new method was suggested for obtaining highly activated carbons from rice hull. This method consists of several steps. First step is removing silicate from rice hull with alkaline solution. During the caustic digestion of rice hull ash to produce a caustic silicate solution, the amorphous silica reacts with the alkaline and becomes a soluble compound in the silicate solution. Rice hull free of silicate was treated with water solution of potassium alum and was burned in furnace under the different temperatures. Temperatures in the furnace generally range from 500 °C to about 800 °C. Obtained activated carbons have very high bleaching activity. One percent of that adsorbent was used for bleaching cotton oil and showed 40 % activity of this adsorbent. The main step in this technology is using of potassium alum, it increase adsorptive ability of the adsorbent.

The new method of obtaining activated carbons from rice hull is decrease amount of waste product and allows use it in food industry.

- [1] Proctor A., Clark P.C., Parcer C.A. Rice hull ash adsorbent performance under commercial soy oil bleaching conditions. *JAOCS* N4 1995 p 459-462
- [2] Proctor A. Adsorption of soy oil free fatty acids by rice hull ash. *JAOCS* N1 1990 p 15-18
- [3] Stephens Douglas. Highly activated carbon from caustic digestion of rice hull ash and method International Patent Number WO 00/16896 Date of publication 30.03.2000

### STABILIZÁCIA JEDLÝCH OLEJOV ANTIOXIDAČNÝMI FORMULÁCIAMI NA BÁZE ŠROTOV PUPALKY DVOJROČNEJ

L. ZAHRADNÍKOVÁ, Š. SCHMIDT, S. SEKRETÁR, L. JANÁČ

*Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav biotechnológie a potravinárstva*

Korešpondenční autor: [lucia.zahradnikova@stuba.sk](mailto:lucia.zahradnikova@stuba.sk)

Šroty pupalky dvojročnej, získané priemyselnou extrakciou pupalkových semien superkritickým CO<sub>2</sub> ako

vedľajší produkt pri výrobe pupalkového oleja, boli extrahované etanolom extrakciou podľ a Soxhleta v banke pod spätným chladičom. Etanolový extrakt zo šrotov pupalky dvojročnej bol reextrahovaný etylacetátom a následne butanolom. Získané extrakty sa frakcionovali kolónovou chromatografiou cez náplň Silicagel L 100/200 za použitia metanolu ako elučného činidla. Zbierané frakcie sa na základe hodnôt zistených meraním absorbancie pri 280 nm spojili do niekoľkých konečných frakcií. Antioxidačný účinok extraktov a frakcií zo šrotov pupalky dvojročnej sa stanovil ich prídavkom do jedlých rastlinných olejov, ktorých oxidačná stabilita sa sledovala meraním na prístroji Rancimat pri teplote 110 °C. Na zvýšenie antioxidačnej účinnosti jednotlivých extraktov a frakcií zo šrotov pupalky dvojročnej boli pripravené antioxidačné zmesi. Antioxidačné formulácie sa pripravili zmiešaním extraktu alebo vybraných frakcií s ostatnými komponentami ( $\alpha$ -tokoferol, askorbylpalmitát,  $\beta$ -karotén, kyselina citrónová, kyselina vínna, lecitín, propylénglykol). Antioxidačná aktivita formulácií sa stanovovala taktiež použitím metódy Rancimat pri teplote 110 °C a prídavku formulácie 100 ppm do jedlých olejov a porovnála sa so syntetickým antioxidantom BHT. Celkove bolo pripravených 45 formulácií. Najúčinnějšía formulácia obsahovala  $\alpha$ -tokoferol, askorbylpalmitát,  $\beta$ -karotén, kyselinu vínnu, lecitín, propylénglykol a etylacetátový extrakt a zvýšila oxidačnú stabilitu olejov o 30 %.

Táto práca bola uskutočnená s finančnou podporou grantu VEGA 1/2392/05.

- [1] Wettasinghe, M. - Shahidi, F. - Amarowicz, R.: Identification and quantification of low molecular weight phenolic antioxidants in seeds of evening primrose (*Oenothera biennis* L.). In: *Journal of Agricultural and Food Science*, 50, 2002, s. 1267-1271.
- [2] Šimon, P. - Schmidt, Š. - Koman, V.: An apparatus for the determination of induction periods of fat and oil oxidation. In: *Bulletin of Food Research*, sp. issue, 1986, s. 55-63.
- [3] Schmidt, Š. - Niklová, I. - Sekretár, S.: Antioxidačný účinok extraktov z repkových a pupalkových šrotov. In: *Bulletin potravinárskeho výskumu*, 37, 1998, č. 4, s. 257-265.

## VPLYV POTRAVINÁRSKÝCH PROCESOV NA OBSAH PRÍRODNÝCH ANTIOXIDANTOV

Š. SCHMIDT<sup>1</sup>, S. SEKRETÁR<sup>1</sup>, L. ZAHRADNÍKOVÁ<sup>1</sup>, L. JANÁČ<sup>1</sup>, O. ZUFAROV<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav biotechnológie a potravinárstva

<sup>2</sup>Institute of Biotechnology and Food Science, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Bratislava, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava

Korešpondenčný autor: stefan.schmidt@stuba.sk

Pri mnohých technologických procesoch môže byť odolnosť surovín, poloproduktov alebo priamo potravín voči oxidácii nezmenená. Zjavne ide o mierne procesy, kde vplyvy nenastávajú alebo sa negatívne a pozitívne účinky vyrovnávajú. Ďalším prípadom môžu byť tie procesy, kedy je odolnosť dokonca zvýšená. Dôsledkom býva napr. premena antioxidantov (AO) na viac aktívne zlúčeniny (napr. glykozidy na aglykóny), tvorba nových, antioxidačne pôsobiacich látok - produktov Mailardových reakcií, deštrukcia prooxidantov alebo fotosenzibilizátorov, naviazanie prooxidačne pôsobiacich kovov do neaktívnych komplexov, enkapsuláciou znížený prístup kyslíka a podobne (1). Keďže pri výrobe potravín a aj pri ich kulinárnej úprave tepelné procesy v potravinárstve dominujú, najčastejšie zaznamenávame zníženie oxidačnú odolnosť rôznych potravinárskych matric, najmä tých so zvýšeným obsahom tukov. Ide o také deje, ako je rozklad antioxidantov oxidáciou alebo interakciami s inými zložkami potravy, odparovanie antioxidantov (najmä syntetických), zlepšenie prístupu O<sub>2</sub> (napr. pri sušení), tvorba prooxidantov, resp. ich uvoľnenie z inaktívnych komplexov a mnohé ďalšie. Rôzne formy oxidačného rozkladu prírodných antioxidantov sú cieľom tohto príspevku.

Účinky syntetických AO na potraviny sú dnes dobre preštudované, dá sa ale predpokladať, že nastane preferencia výrobcov i konzumentov potravín na prírodné antioxidanty (2). U nich sú však menej známe zmeny a ich interakcie so zložkami potravín, čo nutne vedie k rozsiahlym výskumom. Najrozšírenejšie a pomerne dobre preštudované AO sú tokoferoly, karotenoidy a kyselina askorbová, najmä však v tukoch a olejoch, resp. v modelových potravinách. Antioxidačná účinnosť extraktov bylín (napr. rozmarínu, šalvie, tymiánu, majoránu, pupalky), rôzneho korenia, prípadne aj niektorých vedľajších produktov potravinárskeho priemyslu (napr. extraktových šrotov), je v súčasnosti podrobne študovaná.

Táto práca bola podporená Slovenskou grantovou agentúrou VEGA, č. projektu: 1/2392/05.

- [1] POKORNÝ, J., SCHMIDT, Š. Natural antioxidant functionality during food processing. In Pokorný, J., Yanishlieva, N., Gordon, M. eds. *Antioxidants in food*. Cambridge: Woodhead Publishing, 2001. ISBN 1-855573-463-X. p. 331-354
- [2] SCHMIDT, Š., POKORNÝ, J. Potential applications of oilseeds as sources of antioxidants for food lipids - a review. *Czech Journal of Food Science*. Vol. 23, no. 3 (2006), p. 93-102

# Register autorov

## A

ADAM, V., 81, 168, 223  
ADAMČÍKOVÁ, L., 68  
ALMEIDA PAZ, F.A., 83  
AMAROWICZ, R., 136  
AMBROVÁ, M., 97, 177  
ARANYOSIOVÁ, M., 55, 174, 175  
ÁRVAY, J., 131  
ASRESAHEGNOVÁ, Z., 174

## B

BABOR, K., 245  
BABUNĚK, M., 149  
BAČÁKOVÁ, L., 185  
BACHAN, D., 179  
BAČOVÁ, Z., 119  
BAJČAN, D., 131, 253  
BAJDICHOVÁ, M., 204  
BAKOŠOVÁ, D., 92  
BALENTOVÁ, E., 106  
BALOGOVÁ, J., 258  
BALOUN, J., 81, 168  
BANÁŠ, P., 78, 122  
BARÁTH, O., 251  
BARBOŘÍKOVÁ, L., 106  
BAREK, J., 55, 56, 74, 159, 163–166  
BARILLOVÁ, L., 183  
BÁRTA, J., 149  
BARTÁK, P., 56  
BARTOŠOVÁ, I., 72  
BARTŮNĚK, V., 182  
BARTUŠEK, K., 168  
BAŠOVÁ, P., 98  
BAXOVÁ, L., 265  
BEČVAŘÍK, P., 117  
BEDNÁR, P., 215  
BEDNÁRIKOVÁ, A., 133  
BEINROHR, E., 167  
BĚLINA, P., 92, 93  
BELLA, M., 193  
BĚLOHLAV, Z., 67  
BĚLUŠA, J., 200, 266  
BENČÍKOVÁ, E., 157, 259  
BENEŠ, L., 87  
BENEŠOVÁ, C., 133  
BENICKÁ, E., 56  
BENKO, J., 260, 261  
BENKOVÁ, Z., 76

BERNAUER, B., 142  
BERTOLASI, V., 149, 209  
BEZDIČKA, P., 190  
BEZOUŠKA, K., 98  
BIELICH, M., 183  
BÍLEK, M., 120, 122  
BILLIK, P., 186  
BLÁHOVÁ, M., 166  
BLAŽEJ, A., 54  
BLAŽKOVÁ, M., 134  
BLEHA, T., 76, 144  
BOCA, M., 78  
BODIŠ, P., 235  
BOHÁČ, A., 117, 119  
BÖHM, S., 247  
BOHMOVÁ, B., 63  
BOJŇANSKÁ, T., 218  
BOKOVÁ, V., 165  
BOLEČEK, P., 64  
BOLYÓ, J., 225  
BORTEL, E., 145  
BOŤANSKÁ, P., 234  
BOUZEK, K., 236, 240  
BRAUNEROVÁ, G., 199  
BRETŠNAJDROVÁ, E., 92  
BŘÍZA, T., 111  
BRUNA, T., 252  
BRYNYCH, P., 175, 229  
BUCHALOVÁ, K., 98  
BUCHLOVIČ, M., 99  
BUDĚŠÍNSKÝ, M., 116  
BUDOVSÁ, M., 99, 101  
BUDZÁK, D., 256  
BUDZÁK, Š., 123  
BUGÁR, I., 234  
BUJDOŠOVÁ, Z., 171  
BUKOVSKÁ, R., 164  
BUMA, W.J., 235  
BUŇKA, F., 206  
BURČÁK, M., 84  
BURGERT, L., 248  
BUŠINOVÁ, P., 70  
BYSTRICKÁ, J., 126, 127, 253  
BYSTROŇ, T., 236

## C

ČABALA, R., 74  
CANKAŘ, P., 100, 124, 249, 267

ČÁP, L., 56  
CAPEK, I., 103  
CAPEK, P., 100, 210  
CARLISLE, R., 244  
ČÁRSKY, J., 63  
ČEGAN, A., 79, 81  
ČEJKA, J., 190  
ČERMÁK, P., 140  
ČERNÁK, J., 91  
ČERNÍK, M., 133  
ČERNÝ, J., 171  
ČERNÝ, M., 248  
ČERVENĚ, J., 136, 217  
ČERVENÝ, L., 209  
ČERVENÝ, V., 170  
ČÉRY, J., 125, 131  
CHALOUPKOVÁ, R., 156  
CHALUPOVÁ, Z., 138  
CHEHIMI, M.M., 158, 199, 258  
CHMELA, Š., 107  
CHMIELEWSKA, E., 175  
CHODÁK, I., 109, 158, 198, 258  
CHOMOUCKÁ, J., 59, 90, 242  
CHORVÁT JR., D., 119  
CHORVÁT, D., 62, 111, 211, 234  
CHYBA, J., 182  
CHYBA, V., 246  
CÍBIK, B., 158  
CIBÍKOVÁ, P., 133  
CIBULKA, R., 265  
CIESAROVÁ, Z., 133  
CIFRA, P., 76, 144  
CÍLOVÁ, Z., 142, 190  
CÍSAŘOVÁ, I., 187, 241  
ČIŽMÁR, E., 86  
ČONKA, P., 101  
COPIKOVA, J., 132, 133, 155  
COROBEA, M.C., 103  
CSOMOROVÁ, K., 109  
ČUBA, V., 263  
ČURILLOVÁ, Z., 99, 101  
ČUVANOVÁ, S., 221  
CYRAŇSKI, M.K., 104

**D**

DAHSE, H.M., 199  
DAMBORSKÝ, J., 156  
DANDÁR, A., 255  
DAŇHEL, A., 55  
DANIELIK, V., 97, 177  
DANIHEL, I., 105, 204, 247  
DANKO, M., 60, 115, 197  
DEGIROLAMO, G., 54  
DEJMKOVÁ, H., 166  
DEMNEROVÁ, K., 134  
DEÝLOVÁ, D., 159  
DIÁKOVÁ, K., 252  
DIBLÍKOVÁ, L., 83, 263

DIBUSZOVÁ, E., 216  
DIOPAN, V., 168  
DOHNAL, J., 212  
DOLENSKÝ, B., 107  
DONESCU, D., 103  
DONOVAL, D., 141  
DOPITA, M., 123  
DOUCEK, A., 154  
DOUŠOVÁ, B., 89, 185, 264  
DRÁBIK, M., 237  
DRABINA, P., 102  
DRAJNA, L., 106  
DRAŠAR, Č., 179  
DRAŠAR, P., 198, 208  
DRBOHLAVOVÁ, J., 58, 59  
DRTINOVÁ, B., 263  
DUBAJOVÁ, J., 128  
DUCIUCOVÁ, M., 164  
DUDA, A., 60  
DUDÁŠOVÁ, A., 84  
DUDEK, B., 145  
DUDEK, K., 208  
ŽURČEKOVÁ, T., 173  
DUŠEK, L., 248  
DVOŘÁKOVÁ, M., 202  
DVORSKÁ, M., 207  
DZIK, P., 59, 90, 242  
DŽUBÁK, P., 150

**E**

EBRINGEROVÁ, A., 114, 157, 206, 257  
ELCNEROVÁ, M., 81, 166  
ETRYCH, T., 114

**F**

FADRNÁ, V., 121, 123, 249  
FAJNOR, V.Š., 188  
FARGAŠOVÁ, A., 66, 130, 254  
FARKAŠ, P., 102  
FATUŘÍKOVÁ, K., 92  
FEDORKO, P., 199  
FELČÍR, M., 228  
FESZTEROVÁ, M., 229, 250, 251  
FIALA, J., 83  
FIALOVÁ, L., 103  
FÍLA, V., 140, 142, 188, 190  
FILIPOVÁ, R., 122  
FIRÁKOVÁ, S., 133  
FISCHER, J., 159, 165  
FIŠEROVÁ, A., 179  
FIŠEROVÁ, M., 218  
FLÓRIÁN, K., 165  
FLORIÁN, Š., 103  
FORTUNOVÁ, L., 221  
FRACZAK, B., 104  
FRIDRICHOVÁ, M., 241  
FRÖHLICHOVÁ, Z., 105  
FRUMAR, M., 186, 191

FRUMAROVÁ, B., 186, 191  
FRYŠOVÁ, I., 202, 246  
FUITOVA, L., 185, 264  
FUITOVÁ, L., 89  
FUKAL, L., 134  
FURDÍKOVÁ, K., 234

**G**

GAÁL, A., 163  
GABČOVÁ, J., 83  
GABEROVÁ, L., 221  
GAJDOSOVA, Z., 256  
GAJDOŠOVÁ, Ž., 219, 220  
GAJDZIOK, J., 138  
GALAMBOŠ, M., 75  
GALANDOVÁ, J., 162, 236  
GÁLIKOVÁ, J., 91  
GALKOVÁ, S., 239  
GANAJOVÁ, M., 152  
GAVLASOVÁ, P., 225  
GAŽÁK, R., 98  
GAZURKOVÁ, L., 137  
GEMEINER, P., 225  
GIGAC, J., 218  
GLASER, V., 140  
GLOGAROVÁ, M., 105  
GONDA, J., 101, 203, 210  
GORBÁR, M., 96  
GRANČIČOVÁ, O., 69  
GRECMANOVÁ, H., 123  
GREGÁŇ, F., 207  
GREIF, G., 256  
GREIFOVÁ, M., 129, 256  
GROSOVÁ, Z., 154  
GRÜNER, B., 187  
GRYGAR, T., 264  
GUILLARD, C., 58  
GUSCHLOVÁ, Z., 155  
GYEPES, R., 176, 241  
GYORYOVA, K., 171, 238

**H**

HABART, J., 129  
HAJDÚCH, M., 150, 202  
HAJDÚCHOVÁ, L., 157, 258, 259  
HAMPL, F., 105, 265  
HAMULÁKOVÁ, S., 105, 106  
HANDLOVÁ, M., 246  
HANIKA, J., 246  
HANKOVÁ, Z., 167  
HANTA, V., 257  
HANUSEK, J., 106  
HARANGOZÓ, L., 131  
HARTVICH, P., 161  
HAŠKO, D., 192  
HASSLER, J., 165  
HAVEL, L., 168, 169  
HAVLÍČEK, D., 240

HAVLÍK, M., 107, 111  
HEGEDUS, O., 64, 65, 128, 224, 226  
HEGEDUSOVA, A., 64, 65, 224  
HESSLER, S., 89  
HEJDA, S., 252  
HELÍSKOVÁ, I., 160  
HEPNEROVÁ, J., 61  
HERČKO, I., 250  
HERICH, P., 183  
HERZIGOVÁ, P., 113  
HERZOGOVÁ, L., 185, 264  
HLAVÁČ, J., 115, 150, 267  
HLÁVKA, F., 169, 223  
HLÚBIKOVÁ, S., 167  
HOBZA, P., 81, 171  
HOLAN, M., 149  
HOLCOVÁ, V., 252  
HOLECOVÁ, M., 168  
HOLL, W., 89  
HOLOUBEK, I., 161  
HOLUBOVÁ, R., 124  
HOLÝ, A., 150  
HOMOLOVÁ, M., 129  
HOMZOVÁ, E., 161, 167  
HONZÍČEK, J., 83  
HORA, L., 180  
HOVORKOVA, A., 179  
HRABAL, R., 72  
HRACHOVÁ, J., 188, 198  
HRADECKÝ, J., 169  
HRANÍČEK, J., 170  
HRANICKÁ, Z., 70  
HRČKOVÁ, L., 107  
HRDLIČKA, M., 191  
HRDLOVIČ, P., 120  
HROBOŇOVÁ, K., 173  
HROMÁDKOVÁ, Z., 114, 206  
HRONSKA, H., 154, 218  
HRUBÝ, M., 116, 243  
HRUŠKOVIČOVÁ, A., 126  
HUBIČKOVÁ, M., 260  
HUDEC, P., 184  
HUDECOVÁ, D., 147, 171, 238  
HUNKELER, D., 119  
HUŠÁKOVÁ, B., 74  
HUŠEK, P., 161

**I**

IANCHIS, R., 103  
IMRAMOVSKÝ, A., 196, 212  
IMRICH, J., 105, 106, 108, 110, 204, 247

**J**

JAKEŠ, V., 93  
JAKUBEC, P., 151  
JALOVÝ, Z., 208  
JAMBRICH, M., 63, 67, 139, 157, 256, 258, 259  
JAMPÍLEK, J., 212

- JANÁČ, L., 65, 137, 267, 268  
JANÁČOVÁ, D., 194, 195  
JANÁKOVÁ, S., 188, 189  
JANEK, M., 234  
JANIČEK, M., 79  
JANIGOVÁ, I., 109, 242, 258  
JANOVEC, L., 108, 110, 204  
JAŇOVKOVÁ, J., 62  
JANYPKA, P., 215  
JAVOROVÁ, M., 261  
JEDLOVSKÁ, L., 229  
JEGOROV, A., 190  
JELÍNEK, L., 174  
JEMELKOVÁ, Z., 163  
JENISOVÁ, Z., 153  
JESENÁK, K., 96, 184, 186  
JIRÁK, J., 90, 95  
JIRÁNEK, I., 164  
JIRÁT, J., 215, 216  
JIRÍČEK, I., 83, 263  
JIRKOVSKÝ, J., 262  
JOHN, J., 167  
JOMOVÁ, K., 125, 127, 153, 224  
JÓNA, E., 85, 186  
JORÍK, V., 148  
JUN, D., 72  
JUREČKA, P., 81, 171  
JURIŠOVÁ, J., 97, 177  
JUROK, R., 105  
JŮZOVÁ, Z., 162
- K**  
KAČER, P., 209  
KAFARSKI, P., 82, 203  
KAIM, A., 247  
KAJŇAKOVÁ, M., 86  
KALINA, J., 164  
KALIŇÁK, M., 234  
KALOUSKOVÁ, R., 84, 86, 110, 178, 193  
KALUSOVÁ, M., 70  
KAMAN, O., 240  
KAMENÍČEK, J., 94, 183  
KAMENÍKOVÁ, P., 141, 142  
KANDELOVÁ, M., 166  
KAPLÁNEK, R., 111  
KARAMAC, M., 136  
KARDOŠOVÁ, K., 169  
KARLÍK, M., 72  
KARLOVÁ, T., 135, 219  
KAROVÍČOVÁ, J., 129, 219, 220, 222, 255  
KARPINSKA, M., 111  
KASÁK, P., 111, 118  
KASÁLKOVÁ, N., 185  
KASÍKOVÁ, B., 133, 155  
KAŠPÁRKOVÁ, V., 206  
KATRLÍK, J., 172, 225  
KAUSTOVÁ, J., 113, 199  
KAVALA, M., 156  
KAVALIROVÁ, J., 148  
KAVKOVÁ, D., 173  
KEJIK, Z., 70, 111  
KIEHLING, B., 89  
KIZEK, R., 81, 168, 169, 223  
KLÁNOVÁ, J., 223  
KLÁSEK, A., 192  
KLEČKOVÁ, M., 124, 249  
KLEINOVÁ, A., 158  
KLEINOVÁ, V., 112  
KLEMENTOVÁ, M., 57  
KLIMEŠOVÁ, V., 113  
KLIŠTINCOVÁ, L., 181  
KLUČÁKOVÁ, M., 76, 160, 214  
KLŮSLOVÁ, Z., 128  
KNAP, J., 203  
KNOB, R., 233  
KOBLIHA, D., 162  
KOBLOVSKÁ, R., 221  
KOCHAN, J., 256  
KODÍČEK, M., 216  
KODRLOVÁ, L., 241  
KOHAJDOVÁ, Z., 219, 220, 255  
KOIVUKORPI, J., 70  
KOLÁŘ, M., 87  
KOLÁŘOVÁ, K., 184, 185  
KOLEHMAINEN, E., 70  
KOLENA, J., 157, 246  
KOLLÁR, J., 197  
KOLLÁRIKOVÁ, G., 119  
KOLOMAZNÍK, K., 194, 195, 206  
KOLOUŠEK, D., 185, 264  
KOLOVRATNÍK, M., 263  
KOLSKÁ, Z., 72  
KOMAN, M., 148, 264  
KOMÁREK, K., 81, 166  
KOMERS, K., 79  
KOMERSOVÁ, A., 79  
KOŇÁK, Č., 243  
KORABIK, M., 148  
KORENKO, M., 77  
KÓSA, C., 197  
KOŠATA, B., 215, 216  
KOŠCIELNIAK, P., 145  
KOSINSKA, A., 136  
KOŠŤÁLOVÁ, Z., 114  
KOŠTIAL, P., 92  
KOSTKA, L., 113  
KOTKOVÁ, K., 88  
KOUDELKA, L., 90, 95  
KOUKALOVÁ, D., 74  
KOUKOL, O., 72  
KOUTNÍK, I., 188  
KOUTSKÝ, B., 141  
KOVÁČ, J., 192  
KOVÁČOVÁ, S., 117  
KOVARŽÍK, P., 263  
KOVÁŘOVÁ, J., 61, 171, 201, 238



KOWALSKA, M., 161, 233  
KOZEMPEL, J., 116, 243  
KOZLER, J., 251  
KOŽURKOVÁ, M., 108, 152, 204  
KRAITR, M., 152  
KRAJČOVÁ, E., 256  
KRAKOVIČOVÁ, H., 114  
KRÁL, V., 70, 107, 111  
KRÁLOVÁ, J., 70  
KRÁLOVÁ, Z., 164  
KRÁTKÝ, M., 212  
KRATOCHVÍL, B., 245  
KRAUS, T., 116  
KREJČOVÁ, A., 179  
KŘEN, V., 98, 226  
KŘENEK, K., 98  
KRIŠTIK, J., 184  
KRISTIAN, P., 105, 106, 108, 110, 204, 247  
KRIŠTOFÍKOVÁ, L., 154  
KRÍŽ, M., 266  
KŘÍŽENECKÁ, S., 252  
KRONEK, J., 197, 242, 243  
KRONEKOVÁ, Z., 111, 115  
KRPATOVÁ, L., 76  
KRUPA, I., 62, 115  
KRUPČÍK, J., 56  
KRUPKA, J., 67, 142  
KRUPKOVÁ, L., 147  
KŘUPKOVÁ, S., 115  
KRÝSA, J., 57–59, 262  
KRYŠTOF, V., 100  
KRYŠTOFOVÁ, O., 169, 223  
KUBALA, M., 248  
KUBÁT, P., 241  
KUBRICHT, J., 133  
KUČA, K., 72  
KUCHÁR, J., 91  
KUCHARÍK, M., 180  
KUCHTANIN, V., 146  
KUČKA, J., 116, 243  
KUFČÁKOVÁ, J., 75  
KUKL'OVÁ, L., 152  
KUKUROVÁ, K., 133  
KUMPRECHT, L., 116  
KUNCOVÁ, G., 225  
KUŠNIEROVÁ, L., 117  
KUŠNIEROVÁ, M., 221  
KUTLÁKOVÁ, K., 94  
KUTSCHY, P., 99, 101, 205  
KUZMA, M., 209  
KUZNĚCOVOVÁ, L., 73, 79  
KVÍČALA, J., 117, 149  
KVÍČALOVÁ, M., 187  
KVÍTEK, L., 74, 87, 121–124, 153, 168, 214, 240, 249  
KYSILKA, O., 149

**L**

LABUDA, J., 162, 236

LACÍK, I., 62, 111, 115, 118, 119, 211  
LACNÝ, Z., 137  
LÁCOVÁ, M., 117  
LAGA, R., 113  
LAHODNÝ, F., 189  
LAHUČKÝ, L., 127, 253  
LANG, K., 241  
LANGMAIER, F., 194, 195  
LAURINC, V., 120  
LAZOR, P., 64, 125, 253  
LAZORÍK, J., 146  
LEBEDA, O., 116, 243  
LEDERER, J., 246, 258  
LEDNICKÝ, F., 109  
LEHKOŽIVOVÁ, J., 219, 220, 222, 255  
LEHNERT, R., 225  
LEHOTAY, J., 173  
LEITNER, J., 54, 57  
LENČEŠ, Z., 245  
LEŠKOVÁ, J., 227  
LEWANDOWSKA, A., 104  
LHOTKA, M., 142, 188, 190  
LIBISZOWSKI, J., 60  
LINTNEROVÁ, L., 119  
LIS, A.E., 254  
LIŠKA, F., 208  
LIŽIČÁROVÁ, I., 100  
LOOS, D., 207  
LORENC, D., 234  
LORINZ, Š., 147  
LOŠŤÁK, P., 179  
LUKÁČ, A., 92  
LUKÁČOVÁ, K., 67  
LUKEŠ, V., 120  
LUKINA, A., 56  
LUSKOVÁ, L., 209  
LUSTOŇ, J., 242, 243  
LUXOVÁ, J., 95  
LYČKA, A., 149, 192, 209, 246

**M**

MACHÁČEK, V., 106, 149, 209  
MACHO, V., 156, 158  
MACHOTOVÁ, J., 62  
MACHOVÁ, E., 100  
MACHOVIČ, V., 264  
MACKOVÁ, A., 188  
MÁCOVÁ, Z., 240  
MADAJOVÁ, V., 63  
MADRONOVÁ, L., 251  
MAIER, V., 121, 161, 233  
MAIXNER, J., 57, 155  
MAJERNÍK, V., 184  
MÁJOVÁ, E., 182  
MAJZLÍK, P., 80  
MALACHOVÁ, K., 136, 137, 178, 217, 227  
MALIAR, T., 228  
MALIAROVÁ, M., 228

- MALIMÁNKOVÁ, V., 252  
MALOVÍKOVÁ, A., 157, 206  
MAL'UČKÁ, L., 108  
MAN, S., 99  
MARČEKOVÁ, L., 92  
MARCINČIN, A., 107  
MAREČEK, P., 208  
MAREŠOVÁ, M., 132  
MAROSZOVÁ, J., 264  
MARŠÁLEK, B., 161  
MARŠÁLEK, R., 73, 79  
MARTÍNKOVÁ, L., 226  
MARTINKOVÁ, M., 101, 203, 210  
MARTIŠKA, L., 148  
MARUNA, M., 135  
MAŠEK, V., 74  
MASSA, W., 91  
MASTEIKOVÁ, R., 138  
MASTIHUBA, V., 225  
MASTIHUBOVÁ, M., 196  
MASTNÝ, L., 83, 84, 86, 110, 193  
MATEJDES, M., 260  
MATIKOVÁ-MAL'AROVÁ, M., 185  
MATIS, M., 120  
MATULKOVÁ, I., 241  
MATULOVÁ, M., 100, 210  
MATYK, J., 113  
MAZÚR, M., 148, 234  
MEGIEL, E., 247  
MELÁNOVÁ, K., 87  
MELICHOVÁ, Z., 123, 217  
MELNÍK, M., 62, 146, 147, 264  
MENZELOVÁ, R., 121, 123, 249  
MICHÁLEK, J., 158  
MICHALKA, P., 119  
MIČUŠÍK, M., 199  
MÍKA, M., 188, 189  
MIKELOVÁ, R., 81, 168  
MIKLOŠ, D., 146, 148  
MIKUŁA, J., 60  
MIKULA, M., 96  
MILATA, V., 151, 193  
MILCZAREK, J.M., 145  
MILDE, D., 214  
MINAROVICHOVÁ, L., 255  
MINÍKOVÁ, S., 257  
MINÍKOVÁ, V., 85  
MIŠICÁK, D., 68  
MIŠTOVÁ, E., 174  
MLÁDEK, M., 194, 195  
MLČOCH, A., 57  
MŁYNARZ, P., 82, 203  
MOCÁK, J., 173, 230  
MOJŽIŠ, J., 101, 205  
MOKREJŠ, P., 194, 195, 206  
MÖLLMANN, U., 199  
MOLNÁROVÁ, M., 66  
MONCOL, J., 146, 148  
MONREAL FÉRRIZ, J., 196, 212  
MORAVEC, Z., 182  
MORÁVKOVÁ, Z., 196  
MOSINGER, J., 241  
MOŠKOVÁ, D., 109  
MOSNÁČEK, J., 158, 197  
MOŠNER, P., 90, 93  
MOSZNER, N., 200  
MOZEŠ, Š., 206  
MOŽIŠKOVÁ, P., 221  
MRAVČÁKOVÁ, K., 197  
MRÁZOVÁ, V., 173  
MURÁROVÁ, A., 139  
MUSILOVÁ, J., 55, 125–127, 153, 159, 165  
MYDLOVÁ, J., 56
- N**  
NAGATA, Y., 156  
NAGYOVÁ, I., 123, 217  
NAVRÁTIL, T., 56, 159  
NAVRÁTILOVÁ, Z., 70, 71  
NEBŘENSKÁ, Z., 67  
NEČAS, M., 182  
NEDELCEV, T., 62  
NEKVINDOVA, P., 188, 189  
NĚMEC, I., 241  
NĚMEC, P., 241  
NEMEČEK, P., 173  
NEVĚČNÁ, T., 122, 168  
NEZBEDA, I., 144  
NGUYEN THI, T.H., 198  
NIČ, M., 215, 216  
NÓGELLOVÁ, Z., 198  
NOSÁL'OVÁ, G., 210  
NOSEK, J., 262  
NOVÁČKOVÁ, M., 177, 236  
NOVÁK, F., 72  
NOVÁK, I., 103, 158, 258  
NOVÁK, J., 251  
NOVÁK, M., 133, 252  
NOVÁKOVÁ, Z., 198  
NOVOTNÁ, M., 185  
NOVOTNÁ, P., 57, 59  
NOVOTNÁ, V., 105  
NOVOTNÝ, Č., 228  
NOVOTNÝ, I., 192  
NOVOTNÝ, R., 74
- O**  
OBERHOLZER, J., 119  
OKTÁBEC, Z., 211  
OLEXOVÁ, A., 69  
OLŠOVSKÝ, M., 156, 158  
OMASTOVÁ, M., 197, 199  
OMELKA, L., 80  
ONDRÁČKOVÁ, J., 192  
ONDREJKOVIČOVÁ, I., 130, 239  
ONDRUŠOVÁ, D., 97, 148, 238

OPATRŇY, P., 120  
ORAVCOVÁ, K., 129  
ORENDÁČOVÁ, A., 86  
ORSÁK, M., 255  
OSLANSKÁ, J., 175  
OSTŘÍŽEK, P., 190  
OSWALD, J., 188  
OTYEPKA, M., 78, 122  
OVADEKOVA, R., 236  
OŽĐANOVÁ, J., 88

**P**

PACIGOVÁ, S., 176  
PAGÁČOVÁ, J., 92  
PAJTÁŠOVÁ, M., 97, 148, 238, 264  
PAJTINKA, M., 227  
PALARČÍK, J., 223  
PALÁT, K., 199  
PANÁČEK, A., 74, 87, 153, 214, 240  
PANÁČKOVÁ, A., 214  
PÁNEK, P., 137  
PARCHANSKI, V., 191  
PAŘÍZEK, M., 185  
PARSCHOVÁ, H., 174  
PAŠEK, J., 67, 140, 142  
PASTIEROVÁ, J., 254  
PATERA, J., 142  
PATEROVÁ, J., 149  
PAULÍKOVÁ, H., 204  
PAVLÍČEK, M., 249  
PAVLÍČKOVÁ, Z., 136, 137, 178, 217, 227  
PAVLÍK, V., 65, 85, 148, 224  
PAVLÍKOVÁ, E., 258  
PAVLINEC, J., 200  
PAZDERA, P., 150, 200, 266  
PECHAR, M., 244  
PEČINKA, P., 136, 217  
PECKOVÁ, K., 55, 56, 74, 159, 164, 165  
PEKAŘ, M., 70, 80, 214  
PETR, J., 161, 233  
PETRISKO, M., 140  
PETROVIČ, P., 233  
PETRŮ, J., 260  
PIKNA, L., 77  
PILÁTOVÁ, M., 101, 205  
PINKAS, J., 182, 190  
PIVEC, V., 261  
PLESCH, G., 96  
PLEŠEK, J., 187  
PLEŠKOVÁ, M., 193  
PLEVOVÁ, E., 71, 96, 181  
PLÍŠKOVÁ, M., 84  
PLŠKO, A., 92, 183, 215  
PODEŠVA, J., 61, 201  
PODOBEKOVÁ, S., 139  
PODSKOČOVÁ, J., 119  
POHOŘELÝ, M., 129, 141, 142  
POLA, R., 244

POLÁČKOVÁ, V., 259  
POLÁKOVÁ, L., 135, 219  
POLÁKOVÁ, M., 134  
POLČÍK, M., 232  
POLCR, P., 81  
POLOMSKÝ, J., 149  
POSPÍŠIL, M., 263  
POTÁČEK, M., 99  
POTOČŇÁK, I., 84, 86  
POUZAR, M., 223  
POŽIVIL, J., 257  
PRAUS, P., 178  
PŘIBYLOVÁ, M., 202  
PROKEŠ, O., 154, 260  
PROKLEŠKOVÁ, E., 93  
PROKOP, R., 54  
PROKOP, Z., 156  
PROKOPOWICZ, M., 82  
PROKŮPEK, L., 61, 62  
PRON, A., 54  
PRUCEK, R., 74, 87, 240  
PUDELOVÁ, N., 202  
PUNČOCHÁŘ, M., 129, 141, 142  
PUZENAT, E., 58

**Q**

QI, M., 119

**R**

RÁBARA, L., 55  
RABIŠKOVÁ, M., 139  
RÁBOVÁ, L., 90, 242  
RAČKO, D., 60, 197  
RAJEC, P., 75  
RAKOVSKÝ, E., 181, 238, 259  
RANC, V., 233  
RASCHMANOVÁ, J., 203  
RAUCH, P., 134  
RÁZGA, M., 226  
REHÁKOVÁ, M., 221  
REISS, P., 54  
REMKO, M., 71, 232  
REPICKA, Z., 148  
REVŮS, M., 63  
ŘEZNÍČKOVÁ, A., 178  
RICHTR, V., 152  
ROBSTECKOVA, M., 190  
ROČKOVÁ, D., 198  
RODE, B.M., 71  
RODOVÁ, A., 133  
ROJÍK, P., 251  
ROMÃO, C.C., 83  
ROSENBERG, M., 154, 218  
RUBEŠOVÁ, K., 182  
RUDINSKÁ, G., 97, 148, 238  
RULÍŠEK, L., 78  
RUPPENTALOVÁ, L., 73, 79  
RŮŽIČKA, A., 149

- RŮŽIČKA, K., 57  
RUZICKOVA, S., 169  
RYBÁČKOVÁ, M., 117, 149  
RYCHLOVSKÝ, P., 170  
RYDZEWSKA, A., 203  
RYPAROVÁ, O., 161, 233
- S**  
SABOL, M., 84  
SABOLOVÁ, D., 108, 204  
ŠAFAŘÍK, I., 166  
ŠAFAŘÍKOVÁ, M., 166  
ŠAFRÁNEK, J., 62  
ŠAJBIDOR, J., 143  
SAJDL, P., 260  
ŠAJGALÍK, P., 245  
SALAYOVÁ, A., 205  
SALIŠOVÁ, M., 117, 119, 259  
SAMEŠOVÁ, D., 217  
SAMUEL, M., 183  
SAPIETOVÁ, M., 186  
SASINKOVÁ, V., 206, 257  
ŠATKA, A., 141  
SATO, Y., 156  
ŠAUŠA, O., 184  
SAYIN, S., 265  
SAZANOV, Z., 246  
ŠČASNÍKOVÁ, K., 157, 259  
SCHINKMANOVÁ, M., 150  
SCHMIDT, H., 86  
SCHMIDT, Š., 65, 137, 219, 256, 267, 268  
SCHÜTZNEROVÁ, E., 100  
SCHWENDT, P., 91, 181  
ŠEBESTA, M., 117, 262  
ŠEBESTA, R., 259  
SEDLÁČEK, P., 76  
SEDLÁK, M., 102  
SEDLÁŘOVÁ, I., 140  
SEDMIDUBSKÝ, D., 54, 57  
ŠEFČOVIČOVÁ, J., 225  
SEGLA, P., 146  
SEIDLEROVÁ, J., 177, 236  
SEJÁKOVÁ, Z., 227  
SEKRETÁR, S., 65, 137, 267, 268  
SEMELOVÁ, M., 167  
SENDREJOVÁ, E., 136  
SERKAEV, Q., 267  
ŠERŠEŇ, F., 207  
ŠEVČÍK, J., 161, 233  
ŠEVČÍK, P., 68  
SEYMOUR, L., 244  
SHESTIVSKA, V., 168  
ŠIARNIK, M., 157, 259  
ŠÍCHA, V., 187  
SIEGEL, J., 85, 178  
SIEVÄNEN, K., 70  
ŠIGUT, K., 149  
ŠILHÁNKOVÁ, A., 208  
SILNÝ, P., 152  
ŠÍMA, J., 252  
ŠIMÁK, O., 208  
ŠIMBERA, J., 150, 200, 266  
ŠIMEK, J., 86  
ŠIMEK, P., 161  
ŠIMKOVÁ, D., 162  
ŠIMKOVÁ, S., 224, 226  
ŠIMON, P., 176, 262  
ŠIMONOVÁ, I., 129  
ŠIMŮNEK, P., 149, 209  
ŠINDELÁŘ, Z., 94  
SIROTEK, V., 152  
SIVÁK, M., 176  
SKALICKÝ, M., 117, 149  
SKOBLJA, S., 141, 142  
ŠKRHA, J., 162  
SKUPINSKA, J., 111  
SLAVĚTÍNSKÁ, R., 86, 110  
SLEPIČKA, P., 85, 178  
ŠLOUF, M., 85  
SLOUKA, J., 202, 246  
SLOVÁK, V., 73, 79  
SMÉKAL, Z., 94  
ŠMIDRKAL, J., 135, 219  
SMRČKOVÁ, O., 93, 182  
SMREKOVA, E., 262  
ŠŇUPÁREK, J., 62  
SOLČAN, T., 151  
ŠOLCOVÁ, O., 258  
SOUKUPOVÁ, J., 74, 87, 153, 214, 240, 249  
ŠOURKOVÁ, P., 186  
ŠPAČEK, V., 61  
SPÁČILOVÁ, L., 115, 150  
ŠPIRKOVÁ, J., 188, 189  
ŠPÍRKOVÁ, M., 85, 158, 258  
ŠPLÍCHALOVÁ, J., 209  
ŠPONER, J., 78  
SPORZYNSKI, A., 104  
ŠRANK, Z., 83, 84, 86, 110, 193  
SRNÁNEK, R., 141  
SROKOVÁ, I., 157, 206, 257  
STACH, M., 111, 118  
STACHOVÁ, P., 148  
ŠTAMBERG, K., 167  
STAŇOVÁ, I., 92, 215  
STANOVIČ, R., 131  
ŠTARHA, P., 94  
STARKBAUMOVÁ, L., 67  
STAŠŠÍKOVÁ, D., 183  
ŠTEFÁNOVÁ, S., 77  
ŠTEFUCA, V., 225  
STEJSKAL, K., 168, 223  
ŠTEPÁNKOVÁ, K., 185  
ŠTĚPÁNKOVÁ, Š., 79  
ŠTĚPNIČKA, P., 143  
ŠTEVIAR, M., 158, 258  
STOPKA, P., 258

ŠTOSO VÁ, T., 153, 214, 249  
STRAKA, M., 57  
STRAKOVÁ, M., 156  
ŠTRBÁK, V., 119  
ŠTROFOVÁ, J., 152  
STROHALM, M., 216  
ŠTRUNCOVÁ, L., 149  
STUPAVSKÁ, M., 174  
ŠTURDÍKOVÁ, M., 133, 135  
STÝSKALA, J., 267  
ŠUBČÍK, J., 90, 95  
ŠUBR, V., 113  
SUCHÁNEK, M., 132  
ŠUGÁRKOVÁ, V., 71, 96  
ŠUJAN, P., 194  
SUKOP, S., 206  
ŠULC, M., 234, 261  
ŠULCOVÁ, J., 183, 215  
ŠULCOVÁ, P., 93, 95  
ŠVANCARA, I., 163  
ŠVARCOVÁ, M., 110, 139  
SVATOŠOVÁ, J., 216  
ŠVECOVÁ, B., 188, 189  
ŠVEDA, O., 226  
ŠVIKRUHOVÁ, J., 64, 226  
SVOBODA, J., 87, 105  
SVOBODA, K., 129  
SVOBODA, L., 62, 92  
SVOBODA, P., 54, 57  
SVOBODOVÁ, M., 149, 209  
ŠVORČÍK, V., 85, 178, 184, 185  
ŠVOREC, J., 146  
SVOZIL, D., 78  
ŠYC, M., 129  
SÝKOROVÁ, D., 93, 182  
SYNYTSYA, A., 132, 155  
SZABOVÁ, E., 217  
SZÖCS, V., 234

**T**  
TARKOWSKI, P., 124, 249  
TELK, A., 145  
TENKRÁT, D., 154  
TICHÁ, H., 88  
TKÁČ, J., 225  
TLUSTOŠ, P., 129  
TOMANOVÁ, V., 157  
TOMÁŠ, J., 64, 125, 126, 131, 253  
TOMAŠČIKOVÁ, J., 247  
TOMÁŠKA, L., 262  
TOMÁŠKOVÁ, N., 204  
TÓTH, T., 64, 125, 127, 131, 153  
TRÁVNÍČEK, Z., 185  
TRCHOVÁ, M., 199  
TREBICHALSKÝ, P., 253  
TREJBAL, J., 140  
TŘEŠŇÁKOVÁ, P., 192  
TRNKOVÁ, L., 81, 168, 169, 223

TROJAN, M., 95  
TUKAČ, V., 246  
TURICOVÁ, M., 178  
TURJAN, J., 210  
TVRDOŇOVÁ, M., 210

**U**

UČŇOVÁ, L., 211  
UHER, M., 63, 64  
UHNÁKOVÁ, B., 226  
ULBRICH, K., 113, 114, 243, 244  
UNGVARSKÝ, J., 108, 110  
URBAN, O., 164  
URMINSKÁ, D., 136, 217, 218

**V**

VÁCLAVKOVÁ, L., 194, 195  
VACULÍKOVÁ, L., 70, 71, 96, 181  
VALACH, M., 172  
VALACHOVÁ, M., 228  
VALÁŠKOVÁ, M., 177  
VÁLEK, L., 94, 183  
VALENT, I., 233, 235, 262  
VALENTA, P., 83  
VALIGURA, D., 148  
VALKO, M., 234  
VALTEROVÁ, I., 155  
VANČO, J., 207  
VANĚK, T., 202  
VANTOVÁ, Z., 204  
VARGOVÁ, A., 65, 224  
VARGOVÁ, M., 96, 184, 188  
VARMUSOVÁ, E., 173  
VAŠEK, V., 194, 195  
VAŠÍČKOVÁ, M., 249  
VASKOVÁ, Z., 148  
VASSANYI, Z., 128  
VAVRA, M., 84, 86  
VAVŘÍKOVÁ, E., 196, 212  
VEČEŘA, M., 61  
VEČEŘOVÁ, R., 87  
VÉGH, D., 120  
VEJVODA, V., 226  
VELIČ, D., 55, 174, 175, 234  
VESELÁ, A., 132, 155  
VESELÁ, M., 59, 90  
VESELÝ, M., 58, 59, 90, 221, 242  
VETCHY, D., 139  
VETEŠNÍK, A., 167  
VEVERKOVÁ, J., 84  
VÍDENSKÝ, J., 140  
VÍGLASKÝ, V., 213  
VILKOVÁ, M., 108  
VINCZE, A., 141, 192  
VINŠOVÁ, J., 196, 211, 212  
VITÁSKOVÁ, L., 93  
VÍTKOVÁ, K., 56, 233  
VLČEK, M., 249

VLČKOVÁ, V., 249  
VNENČÁKOVÁ, J., 67, 258  
VOGT, U.F., 96  
VOJTOVÁ, V., 93  
VOLDŘICH, M., 222, 255  
VOLLÁROVÁ, O., 260, 261  
VOLLMANNOVÁ, A., 125–127  
VON DER LIETH, C., 232  
VONDRÁŠEK, J., 81  
VOPÁLKA, D., 167  
VOSECKÝ, M., 141, 142  
VOŠTIAR, I., 225  
VRÁNKOVÁ, A., 162  
VYSKOČIL, V., 159, 165

**W**

WAISSER, K., 173  
WALDNER, G., 59  
WALKO, M., 213  
WENGEL, J., 98  
WIDIMSKÝ, JR., J., 162  
WITEK, E., 145  
WOJTOWICZ, P., 71  
WOLSZCZAK, M., 60  
WOUTERSEN, S., 235

**Y**

YOSYPCHUK, B., 56, 146, 159

**Z**

ZACHAŘ, P., 228  
ZACHER, T., 69  
ZAGORSKA, M., 54  
ZAHRADNÍČKOVÁ, H., 161  
ZAHRADNÍK, I., 233, 235  
ZAHRADNÍKOVÁ, A., 233, 235  
ZAHRADNÍKOVÁ, L., 65, 137, 267, 268  
ZAITZ, M.M., 145  
ZAJKOSKA, P., 227  
ZAJONCOVÁ, L., 124, 153, 214, 249  
ŽÁK, Z., 91  
ZÁLEŠÁKOVÁ, J., 63  
ZÁMOSTNÝ, P., 67  
ZANCHETTA, V., 58  
ZAPADLO, M., 56  
ZAPLETAL, M., 140  
ZATLOUKAL, M., 213  
ZAUJEC, A., 229  
ZBOŘIL, R., 87, 190, 240  
ZBUROVÁ, M., 205  
ZEDKOVÁ, L., 139  
ZEHNÁLEK, J., 168, 169, 223  
ZELINKA, T., 162  
ZIMA, J., 55, 159, 163, 166  
ZIMA, V., 87  
ZITA, J., 58, 59  
ŽITŇAN, M., 170  
ZIYATDINOVA, G., 162, 236

ZIEBA-PALUS, J., 145  
ZLÁMAL, M., 59, 262  
ZNALEZIONA, J., 161, 233  
ZNAMENÁČEK, J., 216  
ZOUFALÝ, T., 172, 175, 229  
ZUFAROV, O., 65, 267, 268  
ŽÚRKOVÁ, L., 238, 259

# Program

## 2. 9. 2007 (Nedeľa)

- 09:00–18:00 Registrácia účastníkov, recepcia Hutník II
- 14:00–17:00 Organizovaný odvoz autobusmi zo železničnej stanice Poprad
- 19:00–00:00 Uvítací večierok

## 3. 9. 2007 (Pondelok)

- 08:30–09:00 Odvoz autobusmi z hotela Hutník do Tatranskej Lomnice, kino Tatry
- 09:00–09:45 Otvorenie zjazdu
- 09:45–10:30 Plenárna prednáška Prof. Ertla
- 10:30–12:00 Príhovory
- 12:00–12:30 Valné zhromaždenie SChS, kino Tatry
- 12:00–14:20 Obed v hoteli Hutník

### 14:20–15:10 Pozvané prednášky

14:20 ORGANIC-INORGANIC HYBRID MATERIALS FOR MOLECULAR ELECTRONICS  
A. PRON, G. DEGIROLAMO, R. PROKOP, P. REISS, M. ZAGORSKA . . . . . 54

14:20–15:10  
14:20 BIOLOGIZÁCIA CHEMICKÝCH TECHNOLOGIÍ V 21. STOROČÍ  
A. BLAŽEJ . . . . . 54

### 15:10–15:15 Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií

### 15:15–15:25 Úvodné slová v jednotlivých sekciách

### 15:25–18:25 Prednášky – sekcia 1

15:25 TERMODYNAMICKÉ VLASTNOSTI  $\text{Cr}_2\text{GaN}$  A  $\text{Cr}_3\text{GaN}$  A VÝPOČET FÁZOVÝCH DIAGRAMŮ SYSTÉMU Cr-Ga-N  
J. LEITNER, D. SEDMIDUBSKÝ, P. SVOBODA . . . . . 54

15:50 CHARAKTERIZÁCIA SUPRAMOLEKULOVÝCH VRSTIEV TIOLOVANÝCH CYKLODEXTRÍNOV METÓDOU HMOTNOSTNEJ SPEKTROMETRIE SEKUNDÁRNYCH IÓNOV  
L. RÁBARA, M. ARANYOSIOVÁ, D. VELIČ . . . . . 55

### 16:15 Prestávka – občerstvenie

16:45 AMPEROMETRICKÁ DETEKCE SUBMIKROMOLÁRNÍCH KONCENTRACÍ GENOTOXICKÝCH A EKOTOXICKÝCH LÁTEK POMOCÍ NETRADIČNÍCH PRACOVNÍCH ELEKTROD  
J. BAREK, K. PECKOVÁ, A. DAÑHEL, J. MUSILOVÁ, J. ZIMA . . . . . 55

17:10 IONTOVÉ KAPALINY - MODERNÍ TRENDY V ANALYTICKÉ CHEMII  
M. ZAPADLO, E. BENICKÁ, K. VÍTKOVÁ, J. MYDLOVÁ, L. ČÁP, P. BARTÁK, J. KRUPČÍK . . . . . 56

17:35 VYUŽITÍ NOVÝCH KOMPOZITNÍCH PEVNÝCH AMALGÁMOVÝCH ELEKTROD V ANORGANICKEJ I ORGANICKEJ ELEKTROANALÝZE  
T. NAVRÁTIL, B. YOSYPCHUK, A. LUKINA, K. PECKOVÁ, J. BAREK . . . . . 56

18:00 STANOVENÍ TEPELNÝCH KAPACIT SMĚSNÝCH OXIDŮ  $\text{Sr}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$  A  $\text{Ca}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$   
J. LEITNER, D. SEDMIDUBSKÝ, K. RŮŽIČKA, M. STRAKA, P. SVOBODA . . . . . 57

<b>15:25–18:25</b>	<b>Prednášky – sekcia 2</b>	
15:25	VÝZKUM APLIKACÍ NANO OXIDU TITANIČITÉHO V ČR <i>A. MLČOCH</i> . . . . .	57
15:50	TENKÉ TRANSPARENTNÍ TiO <sub>2</sub> FILMY - VZTAH MEZI TLOUŠŤKOU, KRYSTALOGRAFICKOU STRUKTUROU A FOTOINDUKOVANÝMI VLASTNOSTMI <i>P. NOVOTNÁ, J. KRÝSA, J. MAIXNER, M. KLEMENTOVÁ</i> . . . . .	57
<b>16:15</b>	<b>Prestávka – občerstvenie</b>	
16:45	COMPARATIVE STUDY OF SELF-CLEANING EFFICACY OF DIFFERENT TiO <sub>2</sub> THIN FILMS <i>J. DRBOHLAVOVÁ, M. VESELÝ, C. GUILLARD, E. PUZENAT</i> . . . . .	58
17:10	VLIV SUBSTRÁTU NA VÝSLEDNÉ FOTOINDUKOVANÉ VLASTNOSTI TENKÝCH TiO <sub>2</sub> FILMŮ <i>J. ZITA, J. KRÝSA, V. ZANCHETTA</i> . . . . .	58
17:35	FOTOKATALYTICKÉ PROCESY NA TRANSPARENTNÍCH VRSTVÁCH OXIDU TITANIČITÉHO <i>M. VESELÝ, P. DZIK, M. VESELÁ, J. CHOMOUCKÁ, J. DRBOHLAVOVÁ</i> . . . . .	59
18:00	APLIKACE POTENCIÁLU PŘI FOTOKATALYTICKÉM ODBOURÁVÁNÍ NA TiO <sub>2</sub> <i>J. KRÝSA, G. WALDNER, J. ZITA, P. NOVOTNÁ, M. ZLÁMAL</i> . . . . .	59
<b>15:25–18:00</b>	<b>Prednášky – sekcia 3</b>	
15:25	THE MOLECULE IN FRONT OF THE MIRROR <i>J. MIKUŁA</i> . . . . .	60
15:50	MOLECULAR DYNAMICS OF STAR-SHAPED POLY(EPSILON-CAPROLACTONE)S IN TETRAHYDROFURAN SOLUTION FOLLOWED BY FLUORESCENCE SPECTROSCOPY <i>J. LIBISZOWSKI, M. DANKO, M. WOLSZCZAK, D. RAČKO, A. DUDA</i> . . . . .	60
<b>16:15</b>	<b>Prestávka – občerstvenie</b>	
16:45	SYNTÉZA A OVĚŘENÍ ÚČINKU POLYMERNÍHO FENOLICKÉHO ANTIOXIDANTU V POLYURETHANOVÝCH SYSTÉMECH <i>L. PROKŮPEK, J. HEPNEROVÁ, V. ŠPAČEK, J. KOVÁŘOVÁ, J. PODEŠVA, M. VEČEŘA</i> . . . . .	61
17:10	VLIV ADITIV ESTERŮ K. METHAKRYLOVÉ NA VLASTNOSTI EP <i>L. SVOBODA, L. PROKŮPEK, J. ŠAFRÁNEK, J. MACHOTOVÁ, J. ŠŇUPÁREK</i> . . . . .	62
17:35	HYBRID SILICAHYDROGELS AS APPROPRIATE MATRICES FOR DIRECT ENCAPSULATION OF VARIOUS BIOLOGICAL SPECIES <i>I. KRUPA, T. NEDELCEV, J. JAŇOVKOVÁ, I. LACÍK, D. CHORVÁT</i> . . . . .	62
<b>15:25–18:00</b>	<b>Prednášky – sekcia 4</b>	
15:25	MUŽ A ŽENA : VEDECKO - HISTORICKÍ ANTAGONISTI <i>M. MELNÍK</i> . . . . .	62
15:50	HISTÓRIA CHEMICKÉJ ANALÝZY PRÍRODNÝCH MINERÁLNYCH A LIEČIVÝCH VÔD NA SLOVENSKU <i>J. ZÁLEŠÁKOVÁ, J. ČÁRSKY</i> . . . . .	63
<b>16:15</b>	<b>Prestávka – občerstvenie</b>	
16:45	K STÉMU VÝROČIU NARODENIA PROF. ING. SAMA STANKOVIANSKÉHO <i>J. ČÁRSKY, V. MADAJOVÁ, B. BOHMOVÁ, M. UHER</i> . . . . .	63
17:10	HISTÓRIA CHEMICKÉHO PRIEMYSLU NA SLOVENSKU <i>M. UHER, M. JAMBRICH, M. REVÚS</i> . . . . .	63
17:35	PROFESORI J. GAŠPERÍK, M. MARKO A T. KREMPASKÝ - VÝZNAMNÉ OSOBNOSTI SLOVENSKEJ CHÉMIE <i>M. UHER</i> . . . . .	64
<b>15:25–18:00</b>	<b>Prednášky – sekcia 5</b>	
15:25	DEKONTAMINÁCIA PÔD MOBILIZÁCIU KADMIA VYUŽITÍM TECHNIKY KONTINUÁLNEJ FYTOEXTRAKCIE <i>A. HEGEDUSOVA, J. ŠVIKRUHOVÁ, P. BOLEČEK, O. HEGEDUS</i> . . . . .	64



15:50	IMISNÁ ZÁŤAŽ OVZDUŠIA PONTRIANSKEJ OBLASTI SÍROU V SR <i>P. LAZOR, J. TOMÁŠ, T. TÓTH</i> . . . . .	64
<b>16:15</b>	<b>Prestávka – občerstvenie</b>	
16:45	SELENIZÁCIA PÔD AKO ÚČINNÁ FORMA OBOHATENIA POŽÍVATÍN SELÉNOM <i>O. HEGEDUS, A. HEGEDUSOVA, A. VARGOVÁ, V. PAVLÍK</i> . . . . .	65
17:10	VPLYV NEPRIAZNIVÝCH FAKTOROV NA OXIDÁCIU TUKOV <i>S. SEKRETÁR, Š. SCHMIDT, L. ZAHRADNÍKOVÁ, L. JANÁČ, O. ZUFAROV</i> . . . . .	65
17:35	ÚČINKY $\text{Cu}^{2+}$ NA RAST A TVORBU FOTOSYNTETICKÝCH PIGMENTOV SEMENÁČIKOV JEDNOKLÍČNOLISTOVÝCH A DVOJKLÍČNOLISTOVÝCH RASTLÍN <i>M. MOLNÁROVÁ, A. FARGAŠOVÁ</i> . . . . .	66
<b>15:25–18:00</b>	<b>Prednášky – sekcia 6</b>	
15:25	STUDIUM VLIVU ROZPOUŠŤEDLA NA HYDROGENACI NITRILŮ <i>J. KRUPKA, Z. NEBŘENSKÁ, J. PAŠEK</i> . . . . .	67
15:50	ŠTRUKTÚRA A VLASTNOSTI TEXTÍLIÍ ZO ZMESI BAMBUSOVÝCH A BAVLENÝCH VLÁKIEN <i>J. VNEČÁKOVÁ, M. JAMBRICH, K. LUKÁČOVÁ</i> . . . . .	67
<b>16:15</b>	<b>Prestávka – občerstvenie</b>	
16:45	VLIV STRUKTURY UHLOVODÍKŮ NA JEJICH CHOVÁNÍ PŘI PYROLÝZE <i>L. STARKBAUMOVÁ, P. ZÁMOSTNÝ, Z. BĚLOHLAV</i> . . . . .	67
<b>18:00–20:00</b>	<b>Večera</b>	
<b>20:00–00:00</b>	<b>Postery – sekcia 1</b>	
1	1Po-Po1: NEKATALYZOVANÉ BROMIČNANOVÉ OSCILÁTORY S ASPIRÍNOM RESP. KYSELINOU SALICYLOVOU AKO SUBSTRÁTMI A VPLYV SURFAKTANTOV <i>D. MIŠICÁK, P. ŠEVČÍK, L. ADAMČÍKOVÁ</i> . . . . .	68
2	1Po-Po2: SUPERSATURÁCIA V KATALYZOVANOM BROMIČNANOVOM OSCILÁTORE S KYSELINOU ACETÓNDIKARBOXYLOVOU <i>D. MIŠICÁK, L. ADAMČÍKOVÁ, P. ŠEVČÍK</i> . . . . .	68
3	1Po-Po3: ŠTÚDIUM VPLYVU ANIÓNOVÉHO, KATIÓNOVÉHO A NEIÓNOVÝCH SURFAKTANTOV NA NEKATALYZOVANÚ OSCILAČNÚ REAKCIU FENOLU S BROMIČNANOM V KYSLOM PROSTREDÍ <i>O. GRANČIČOVÁ, A. OLEXOVÁ, T. ZACHER</i> . . . . .	69
4	1Po-Po4: BILE ACID-PORPHYRIN CONJUGATES: AS NEW SENSOR FOR CANCER SACCHARIDES BIOMARKERS <i>Z. KEJIK, V. KRÁL, J. KRÁLOVÁ, J. KOIVUKORPI, K. SIEVÄNEN, E. KOLEHMAINEN</i> . . . . .	70
5	1Po-Po5: CHOVÁNÍ LIGNITU VE VODNÉM PROSTŘEDÍ <i>P. BUŠINOVÁ, M. PEKAŘ</i> . . . . .	70
6	1Po-Po6: SROVNÁNÍ METOD STUDIA SORPČNÍCH VLASTNOSTÍ MONTMORILLONITU <i>Z. NAVRÁTILOVÁ, Z. HRANICKÁ, M. KALUSOVÁ, L. VACULÍKOVÁ</i> . . . . .	70
7	1Po-Po7: CHARAKTERISTIKA A VLASTNOSTI MONTMORILLONITU MODIFIKOVANÉHO ALKYLAMONIOVÝMI KATIONTY <i>V. ŠUGÁRKOVÁ, Z. NAVRÁTILOVÁ, P. WOJTOWICZ, L. VACULÍKOVÁ, E. PLEVOVÁ</i> . . . . .	71
8	1Po-Po8: EFFECT OF METAL IONS ( $\text{Li}^+$ , $\text{Na}^+$ , $\text{K}^+$ , $\text{Mg}^{2+}$ , $\text{Ca}^{2+}$ , $\text{Ni}^{2+}$ , $\text{Cu}^{2+}$ AND $\text{Zn}^{2+}$ ) AND WATER COORDINATION ON THE STRUCTURE OF GLYCINE AND ZWITTERIONIC GLYCINE <i>M. REMKO, B.M. RODE</i> . . . . .	71
9	1Po-Po9: STANOVENÍ AROMATICITY HUMINOVÝCH KYSELIN POMOCÍ LS 13C NMR SPEKTROSKOPIE <i>F. NOVÁK, R. HRABAL, O. KOUKOL, I. BARTOŠOVÁ</i> . . . . .	72
10	1Po-Po10: ODHADOVÉ METODY PRO URČENÍ NĚKTERÝCH CHARAKTERISTIK ORGANICKÝCH LÁTEK NA ZÁKLADĚ ZNALOSTI JEJICH STRUKTURY <i>Z. KOLSKÁ, K. KUČA, D. JUN, M. KARLÍK</i> . . . . .	72

11	1Po-Po11: VLIV pH NA ADSORPCI TĚŽKÝCH KOVŮ NA UHLÍKATÝCH MATERIÁLECH <i>R. MARŠÁLEK, V. SLOVÁK, L. KUZNĚCOVOVÁ, L. RUPPENTALOVÁ</i> . . . . .	73
12	1Po-Po12: POVRCHEM ZESÍLENÁ RAMANOVA SPEKTROSKOPIE 1-METHYLADENINU ZA VYUŽITÍ NANOČÁSTIC STŘÍBRA <i>R. PRUCEK, L. KVÍTEK, A. PANÁČEK, J. SOUKUPOVÁ, R. NOVOTNÝ, D. KOUKALOVÁ, V. MAŠEK</i> . . . . .	74
13	1Po-Po13: VYUŽITÍ BŮREM DOPOVANÉ DIAMANTOVÉ ELEKTRODY PRO VSÁDKOVÉ A PRŮTOKOVÉ ANALÝZY THIOLŮ KREVNÍ PLASMY <i>K. PECKOVÁ, B. HUŠÁKOVÁ, R. ČABALA, J. BAREK</i> . . . . .	74
14	1Po-Po14: SEPARATION OF LONG LIVED RADIONUCLIDES FROM ENVIRONMENTAL SAMPLES AND RADIOACTIVE WASTE - OVERVIEW <i>M. GALAMBOŠ, J. KUFČÁKOVÁ, P. RAJEC</i> . . . . .	75
15	1Po-Po15: VLASTNOSTI SEMIFLEXIBILNÉHO POLYMÉRNEHO REŤAZCA V SFÉRICKEJ DUTINE <i>Z. BENKOVÁ, P. CIFRA, T. BLEHA</i> . . . . .	76
16	1Po-Po16: EXTRAKCE MĚDNATÝCH IONTŮ Z GELU HUMINOVÝCH KYSELIN <i>P. SEDLÁČEK, L. KRPA TOVÁ, M. KLUČÁKOVÁ</i> . . . . .	76
17	1Po-Po17: INTERFACIAL TENSION BETWEEN ALUMINUM AND CRYOLITE MELTS DURING ELECTROLYSIS OF THE SYSTEMS $\text{Na}_3\text{AlF}_6$ - $\text{AlF}_3$ (NaF) - $\text{Al}_2\text{O}_3$ <i>M. KORENKO</i> . . . . .	77
18	1Po-Po18: UHLÍKOVÉ NANORŮRKY A ICH VYUŽITIE PRE ELEKTROCHEMICKÚ DETEKCIU <i>S. ŠTEFÁNOVÁ, L. PIKNA</i> . . . . .	77
19	1Po-Po19: DENSITY AND MOLAR VOLUME OF THE MELTS $\text{MF-K}_2\text{NBF}_7$ (MF = LiF-NaF, LiF-KF AND NaF-KF) <i>M. BOCA</i> . . . . .	78
20	1Po-Po20: REACTION MECHANISM OF HEPATITIS DELTA VIRUS RIBORYME SELF-CLEAVAGE REACTION <i>P. BANÁŠ, M. OTYEPKA, L. RULÍŠEK, D. SVOZIL, J. ŠPONER</i> . . . . .	78
21	1Po-Po21: ACIDBAZICKÉ CHOVÁNÍ OXIDAČNĚ ALTEROVANÉHO UHLÍ A SORPCE KOVŮ <i>V. SLOVÁK, R. MARŠÁLEK, L. KUZNĚCOVOVÁ, L. RUPPENTALOVÁ, M. JANÍČEK</i> . . . . .	79
22	1Po-Po22: STANOVENÍ KINETICKÝCH KONSTANT NEINHIBOVANÝCH A INHIBOVANÝCH HYDROLÝZ ACETYLCHOLINU <i>Š. ŠTĚPÁNKOVÁ, K. KOMERS, A. KOMERSOVÁ, A. ČEGAN</i> . . . . .	79
23	1Po-Po23: LIGNIT A RADIKÁLOVÉ PROCESY <i>P. MAJZLÍK, L. OMELKA, M. PEKAŘ</i> . . . . .	80
24	1Po-Po24: STANOVENÍ AKTIVITY STEAROYL-COA-DESATURASY-1 (SCD 1) <i>M. ELCNEROVÁ, A. ČEGAN, K. KOMÁREK</i> . . . . .	81
25	1Po-Po25: STABILIZACE STRUKTURY PROTEINŮ A ROLE DISPERZNÍCH INTERAKCÍ <i>P. POLCR, J. VONDRÁŠEK, P. HOBZA, P. JUREČKA</i> . . . . .	81
26	1Po-Po26: NOVÉ MOŽNOSTI VYUŽITÍ TECHNIKY ADSORPTIVNÍHO PŘENOSU V ANALÝZE BIOLOGICKY VÝZNAMNÝCH SLOUČENIN <i>J. BALOUN, V. ADAM, R. MIKELOVÁ, L. TRNKOVÁ, R. KIZEK</i> . . . . .	81
27	1Po-Po27: CATECHOL-O-METHYLTRANSFERASE INHIBITORS <i>M. PROKOPOWICZ, P. MŁYNARZ, P. KAFARSKI</i> . . . . .	82
<b>20:00-00:00</b>	<b>Postery – sekcia 2</b>	
28	2Po-Po1: ROZPUSTNOST ZLÚČENÍN S OBSAHOM ŽIARUVZDORNÝCH KOVOV <i>J. GABČOVÁ</i> . . . . .	83
29	2Po-Po2: OCHRANA HLINÍKU VODIVÝMI VRSTVAMI VYTVÁŘENÝMI ELEKTROPOLYMERACÍ <i>I. JIŘÍČEK, L. DIBLÍKOVÁ</i> . . . . .	83
30	2Po-Po3: RING-FUNCTIONALIZED MOLYBDENOCENE COMPOUNDS <i>J. HONZÍČEK, C.C. ROMÃO, F.A. ALMEIDA PAZ</i> . . . . .	83
31	2Po-Po4: NOVÝ MATERIÁL PRO VÝROBU DETONAČNÍCH TRUBIC <i>Z. ŠRANK, L. MASTNÝ, P. VALENTA, J. FIALA</i> . . . . .	83

32	2Po-Po5: VLIV STEARANŮ VYBRANÝCH SOLÍ NA STABILITU PVC Z. ŠRANK, J. VEVERKOVÁ, L. MASTNÝ, R. KALOUSKOVÁ, M. PLÍŠKOVÁ . . . . .	84
33	2Po-Po6: BIOLOGICAL ACTIVITY OF COPPER(II) COMPLEXES WITH BIDENTATE N-DONOR LIGANDS AND DICYANAMIDE ANION. I. POTOČNÁK, M. SABOL, M. BURČÁK, M. VAVRA, A. DUDÁŠOVÁ . . . . .	84
34	2Po-Po7: VPLYV PŘÍDAVKU TiO <sub>2</sub> A ZrO <sub>2</sub> NA TERMICKOU STABILITU LÍT-NOKREMIČITÝCH SKIEL VOČI KRYŠTALIZÁCIÍ. V. PAVLÍK, E. JÓNA, V. MINÍKOVÁ . . . . .	85
35	2Po-Po8: POVRCHOVÉ VLASTNOSTI KOVOVÝCH NANOVRSTEV NA PET P. SLEPIČKA, J. SIEGEL, V. ŠVORČÍK, M. ŠLOUF, M. ŠPÍRKOVÁ . . . . .	85
36	2Po-Po9: CRYSTAL STRUCTURES AND MAGNETIC PROPERTIES OF THREE COPPER(II) TETRACYANOPLATINATE COMPLEXES M. VAVRA, I. POTOČNÁK, E. ČIŽMÁR, M. KAJŇAKOVÁ, A. ORENDÁČOVÁ, H. SCHMIDT . . . . .	86
37	2Po-Po10: VLIV POVRCHOVÉ ÚPRAVY ANATASU NA TEPELNOU A SVĚTELNOU STABILITU SMĚSÍ PVC L. MASTNÝ, R. KALOUSKOVÁ, Z. ŠRANK, R. SLAVĚTÍNSKÁ, J. ŠIMEK . . . . .	86
38	2Po-Po11: KINETIKA INTERKALACE ETHANOLAMINU DO ALFA-MODIFIKACE HYDROGENFOSFOREČNANU ZIRKONIČITÉHO J. SVOBODA, V. ZIMA, K. MELÁNOVÁ, L. BENEŠ . . . . .	87
39	2Po-Po12: SYNTHESIS AND ANTIBACTERIAL ACTIVITY OF SILVER COLLOID NANOPARTICLES A. PANÁČEK, L. KVÍTEK, R. PRUCEK, J. SOUKUPOVÁ, M. KOLÁŘ, R. VEČEŘOVÁ, R. ZBOŘIL . . . . .	87
40	2Po-Po13: VLASTNOSTI SKEL SYSTÉMU Li <sub>2</sub> O - TiO <sub>2</sub> - TeO <sub>2</sub> J. OŽĎANOVÁ, H. TICHÁ . . . . .	88
41	2Po-Po14: VYBRANÉ VLASTNOSTI SKEL SYSTÉMU xPbO-20Bi <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -(80-x)B <sub>2</sub> O <sub>3</sub> K. KOTKOVÁ, H. TICHÁ . . . . .	88
42	2Po-Po15: SORPCE OXOANIONTŮ ARSENU NA MODIFIKOVANÝ KAOLIN A JEHO POROVNÁNÍ S KOMERČNÍMI SORBETÝ L. FUITOVÁ, S. HEISLER, B. KIEHLING, B. DOUŠOVÁ, W. HOLL . . . . .	89
43	2Po-Po16: FOTOKATALYTICKÁ AKTIVITA TIŠTĚNÝCH VRSTEV TiO <sub>2</sub> J. CHOMOUCKÁ, P. DZIK, L. RÁBOVÁ, M. VESELÁ, M. VESELÝ . . . . .	90
44	2Po-Po17: STUDIUM FOSFÁTOVÝCH SKEL DOTOVANÝCH OXIDEM BISMUTITÝM J. ŠUBČÍK, J. JIRÁK, L. KOUDELKA, P. MOŠNER . . . . .	90
45	2Po-Po18: OXOKOMPLEXY VANÁDU(V) S ANIÓNY KYSELINY VÍNNEJ J. GÁLIKOVÁ, P. SCHWENDT, Z. ŽÁK . . . . .	91
46	2Po-Po19: LOW-DIMENSIONAL CYANO COMPLEXES WITH [Cu(tacn)] <sup>(2+)</sup> BUILDING BLOCK J. KUCHAR, J. ČERNÁK, W. MASSA . . . . .	91
47	2Po-Po20: STANOVENÍ DÉLKY ŘETĚZCE KONDENZOVANÝCH FOSFOREČNANŮ PRO HODNOCENÍ KVALITY JEJICH VÝROBY P. BĚLINA, E. BRETŠNAJDROVÁ, L. SVOBODA . . . . .	92
48	2Po-Po21: MORPHOLOGY OF OXIDIC LAYERS PREPARED BY SOL-GEL I. STAŇOVÁ, D. BAKOŠOVÁ, A. LUKÁČ, J. PAGÁČOVÁ, A. PLŠKO, P. KOŠTIAL . . . . .	92
49	2Po-Po22: THERMAL BEHAVIOR OF PRECURSOR GELS TiO <sub>2</sub> THIN FILMS J. PAGÁČOVÁ, A. PLŠKO, A. LUKÁČ, I. STAŇOVÁ, L. MARČEKOVÁ, K. FATUŘÍKOVÁ . . . . .	92
50	2Po-Po23: FYZIKÁLNĚ-CHEMICKÉ A KOROZNĚ-INHIBIČNÍ VLASTNOSTI ORTHO-FOSFOREČNANŮ LANTHANOIDŮ P. BĚLINA, V. VOJTOVÁ, P. ŠULCOVÁ . . . . .	93
51	2Po-Po24: VLIV PŘÍDAVKU HALOGENIDŮ NA VLASTNOSTI SUPRAVODIVÉ FÁZE BI-2223 V. JAKEŠ, D. SÝKOROVÁ, O. SMRČKOVÁ . . . . .	93
52	2Po-Po25: BAREVNÉ VLASTNOSTI SLOUČENIN TYPU Ce <sub>0,95</sub> Ln <sub>0,05</sub> O <sub>2</sub> L. VITÁSKOVÁ, P. ŠULCOVÁ . . . . .	93
53	2Po-Po26: BAREVNÉ VLASTNOSTI SLOUČENIN TYPU (Bi <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ) <sub>1-x</sub> (Sm <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ) <sub>x</sub> E. PROKLEŠKOVÁ, P. ŠULCOVÁ, P. MOŠNER . . . . .	93
54	2Po-Po27: VLIV MINERALIZÁTORU NA BAREVNÉ VLASTNOSTI PIGMENTŮ TYPU Al <sub>2-(x+y)</sub> Y <sub>0,5</sub> CE <sub>y</sub> O <sub>3</sub> L. VÁLEK . . . . .	94

55	2Po-Po28: SYNTÉZA A STUDIUM HEXAIZOTHIOKYANATOCHROMITANŮ MĚDNATÝCH S VYBRANÝMI N-DONOROVÝMI LIGANDY <i>K. KUTLÁKOVÁ, Z. SMÉKAL, Z. ŠINDELÁŘ, P. ŠTARHA, J. KAMENÍČEK</i> . . . . .	94
56	2Po-Po29: VLIV VÝCHOZÍCH SUROVIN NA FYZIKÁLNĚ-CHEMICKÉ VLASTNOSTI CaTiO <sub>3</sub> <i>J. LUXOVÁ, P. ŠULCOVÁ, M. TROJAN</i> . . . . .	95
57	2Po-Po30: VLASTNOSTI A STRUKTURA SKEL SYSTÉMU Li <sub>2</sub> O-PbO-B <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> <i>J. JIRÁK, L. KOUDELKA, J. ŠUBČÍK</i> . . . . .	95
58	2Po-Po31: PHOTOCATALYTIC ACTIVITY OF TiO <sub>2</sub> THICK FILMS DEPOSITED ON Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> CERAMIC FOAMS <i>M. GORBÁR, M. VARGOVÁ, G. PLESCH, U.F. VOGT, K. JESENÁK, M. MIKULA</i> . . . . .	96
59	2Po-Po32: THE EFFECT OF SELECTED SANDSTONE MINERALOGICAL COMPOSITION ON FINAL THERMAL EXPANSION <i>E. PLEVOVÁ, L. VACULÍKOVÁ, V. ŠUGÁRKOVÁ</i> . . . . .	96
60	2Po-Po33: THE ELECTROCHEMICAL BEHAVIOUR OF LANTHANUM FLUORIDE IN MOLTEN ALKALI FLUORIDES <i>M. AMBROVÁ, V. DANIELIK, J. JURÍŠOVÁ</i> . . . . .	97
61	2Po-Po34: PŘÍPRAVA A VLASTNOSTI OLOVNATÉHO KRIŠTÁLU S OBSAHOM FILTROVÉHO PRACHU <i>G. RUDINSKÁ, D. ONDRUŠOVÁ, M. PAJTÁŠOVÁ</i> . . . . .	97
<b>20:00–00:00</b>	<b>Postery – sekcia 3</b>	
62	3Po-Po1: PŘÍPRAVA MULTIVALENTNÍCH DERIVÁTŮ ELLIPTICINU <i>P. BAŠOVÁ, K. KŘENEK, R. GAŽÁK, K. BEZOUŠKA, V. KŘEN</i> . . . . .	98
63	3Po-Po2: TARGETING OF ABASIC SITE IN DNA BY PYRENE FUNCTIONALIZED LNA <i>K. BUCHALOVÁ, J. WENGEL</i> . . . . .	98
64	3Po-Po3: NOVEL APPLICATION OF SUBSTITUTED ALLENYLOXIMES IN SYNTHESIS OF HETEROCYCLIC COMPOUNDS <i>M. BUCHLOVIČ, S. MAN, M. POTÁČEK</i> . . . . .	99
65	3Po-Po4: VYUŽITIE CHIRÁLNYCH ELEKTRÓNAKCEPTÓRNYCH SKUPÍN PRI SYNTÉZE OXINDOLOVÉHO FYTOALEXÍNU (S)-(-)-SPIROBRASINÍNU <i>M. BUDOVSÁ, P. KUTSCHY, Z. ČURILLOVÁ</i> . . . . .	99
66	3Po-Po5: 3,5-DIAMINO-4-PYRIDYLZOPYRAZOLY, INHIBITORY CDK <i>P. CANKAŘ, E. SCHÜTZNEROVÁ, V. KRYŠTOF</i> . . . . .	100
67	3Po-Po6: HUMAN PATHOGEN CANDIDA DUBLINIENSIS: A CELL WALL MANNAN WITH A HIGH CONTENT OF ALPHA-1,2-LINKED MANNANOSE RESIDUES <i>I. LIŽIČÁROVÁ, M. MATULOVÁ, P. CAPEK, E. MACHOVÁ</i> . . . . .	100
68	3Po-Po7: STEREOSELECTIVE SYNTHESIS AMINOSUGAR MOIETY OF SOME ANTIBIOTICS AND THEIR ANALOGUES <i>P. ČONKA, M. MARTINKOVÁ, J. GONDA</i> . . . . .	101
69	3Po-Po8: SYNTHESIS AND ANTIPROLIFERATIVE ACTIVITY OF HOMOANALOGUES OF SOME 1-METHOXYINDOLE PHYTOALEXINS <i>Z. ČURILLOVÁ, P. KUTSCHY, M. BUDOVSÁ, J. MOJŽIŠ, M. PILÁTOVÁ</i> . . . . .	101
70	3Po-Po9: PŘÍPRAVA, CHARAKTERIZACE A KATALYTICKÁ AKTIVITA (5-ISOPROPYL-1,5-DIMETHYL-4,5-DIHYDRO-1H-IMIDAZOL-4-ON-2-YL)PYRIDINU. <i>P. DRABINA, M. SEDLÁK</i> . . . . .	102
71	3Po-Po10: SYNTÉZA GLYKOKONJUGÁTŮ: POLYSACHARIDY AKO NOSIČE ANTIGÉNOV <i>P. FARKAŠ</i> . . . . .	102
72	3Po-Po11: KINETICS OF STYRENE AND BUTYL ACRYLATE POLYMERIZATION IN ANIONIC MICROEMULSIONS IN PRESENCE OF LAYERED SILICATES <i>L. FIALOVÁ, I. CAPEK, R. IANCHIS, M.C. COROBEA, D. DONESCU</i> . . . . .	103
73	3Po-Po12: TLAKOVO-CITLIVÉ ADHEZÍVA PLNENÉ ANORGANICKÝM ALEBO ORGANICKÝM POKOVENÝM PLNIVOM <i>Š. FLORIÁN, I. NOVÁK</i> . . . . .	103
74	3Po-Po13: STRUCTURE OF ORTHO-SUBSTITUTED ARYLBORONIC ACIDS <i>B. FRACZAK, M.K. CYRAŃSKI, A. SPORZYNSKI, A. LEWANDOWSKA</i> . . . . .	104

75	3Po-Po14: SYNTHESIS OF NOVEL BIOLOGICALLY INTERESTING ACRIDINE CARBOXAMIDES AND HYDRAZIDES. <i>Z. FRÖHLICHOVÁ, J. IMRICH, P. KRISTIAN, I. DANIHEL, S. HAMULÁKOVÁ</i> . . . . .	105
76	3Po-Po15: NOVÉ KAPALNÉ KRYSYALY S BIFENYLOVÝM JÁDREM S LATERÁLNÍ SUBSTITUCÍ <i>F. HAMPL, R. JUROK, J. SVOBODA, V. NOVOTNÁ, M. GLOGAROVÁ</i> . . . . .	105
77	3Po-Po16: SYNTÉZA NOVÝCH GLYKOKONJUGÁTŮ AKRIDINOVÉHO TYPU <i>S. HAMULÁKOVÁ, E. BALETOVÁ, J. IMRICH, P. KRISTIAN, L. DRAJNA</i> . . . . .	106
78	3Po-Po17: STUDIUM AZOKOPULACE BENZENDIAZONIOVÝCH SOLÍ NA ACETON V IONTOVÉ KAPALINĚ <i>J. HANUSEK, L. BARBOŘÍKOVÁ, V. MACHÁČEK</i> . . . . .	106
79	3Po-Po18: OLIGO TRÖGER'S BASES - NEW BUILDING BLOCKS FOR MOLECULAR ARCHITECTURE <i>M. HAVLÍK, V. KRÁL, B. DOLENSKÝ</i> . . . . .	107
80	3Po-Po19: VPLYV NANOPLNÍV (DISPERAL, CLOISITE A NANOTUBY) NA SVETELNÚ STABILITU POLYPROPYLENOVÝCH NANOKOMPOZITOV. <i>L. HRČKOVÁ, Š. CHMELA, A. MARCINČIN</i> . . . . .	107
81	3Po-Po20: VYUŽITIE 1,3-DIPOLÁRNYCH CYKLOADÍCIÍ NA BÁZE NITRILOXIDOV V SYNTÉZE NOVÝCH AKRIDINYLOVÝCH HETEROCYKLOV <i>L. MALUČKÁ, M. VILKOVÁ, J. IMRICH</i> . . . . .	108
82	3Po-Po21: SYNTÉZA, ŠTRUKTÚRA A CYTOTOXICITA NOVÝCH INTERKALÁTOROV NA BÁZE PROFLAVÍNU <i>J. UNGVARSKÝ, L. JANOVEC, J. IMRICH, P. KRISTIAN, D. SABOLOVÁ, M. KOŽURKOVÁ</i> . . . . .	108
83	3Po-Po22: CHARAKTERIZÁCIA BIODEGRADOVATEĽNÝCH POLYMÉRNÝCH KOMPOZITOV <i>I. JANIGOVÁ, D. MOŠKOVÁ, I. CHODÁK, K. CSOMOROVÁ, F. LEDNICKÝ</i> . . . . .	109
84	3Po-Po23: IMIDAZOLIDINÓNY A GUANIDÍNY PROFLAVÍNU AKO NOVÁ TRIEDA BIOLOGICKY ATRAKTÍVNYCH ZLÚČENÍN <i>L. JANOVEC, J. UNGVARSKÝ, J. IMRICH, P. KRISTIAN</i> . . . . .	110
85	3Po-Po24: UMĚLÉ POVĚTRNOSTNÍ STÁRNUTÍ PVC <i>R. KALOUSKOVÁ, M. ŠVARCOVÁ, L. MASTNÝ, Z. ŠRANK, R. SLAVĚTÍNSKÁ</i> . . . . .	110
86	3Po-Po25: EASILY AVAILABLE FLUOROUS BUILDING BLOCKS <i>R. KAPLÁNEK, M. HAVLÍK, Z. KEJIK, T. BŘÍZA, V. KRÁL</i> . . . . .	111
87	3Po-Po26: CARBONYLATION OF NITROBENZENE AND ANILINE CATALYZED BY PdCl <sub>2</sub> /Fe <sub>2</sub> I <sub>2</sub> /Py CATALYTIC SYSTEM - PROPOSITION OF MECHANISM <i>M. KARPINSKA, J. SKUPINSKA</i> . . . . .	111
88	3Po-Po27: NOVEL BIOCOMPATIBLE ZWITTERIONIC MATERIALS <i>P. KASÁK, Z. KRONEKOVÁ, M. STACH, D. CHORVÁT, I. LACÍK</i> . . . . .	111
89	3Po-Po28: BIODISTRIBUCE MONOKLONÁLNÍ PROTILÁTKY TU-20 A JEJÍHO SCFV FRAGMENTU ZNAČENÉHO 123I V MYŠÍM ORGANISMU ZOBRAZENA POMOCÍ SPECT <i>V. KLEINOVÁ</i> . . . . .	112
90	3Po-Po29: PŘÍPRAVA 4-BENZYLSULFANYLPYRIDIN-2-KARBOXYLOVÝCH KYSELIN JAKO MEZIPRODUKTŮ ANTIMYKOBAKTERIÁLNĚ AKTIVNÍCH LÁTEK <i>V. KLIMEŠOVÁ, P. HERZIGOVÁ, J. MATYK, J. KAUSTOVÁ</i> . . . . .	113
91	3Po-Po30: POLYMEREM MODIFIKOVANÉ VEKTORY PRO DOPRAVU GENOVÉ INFORMACE <i>L. KOSTKA, V. ŠUBR, R. LAGA, K. ULBRICH</i> . . . . .	113
92	3Po-Po31: PECTIC POLYSACCHARIDES FROM NON-UTILISED BIOMASS OF PUMPKIN (CUCURBITA PEPO VAR. STYRIACA). <i>Z. KOŠŤÁLOVÁ, Z. HROMÁDKOVÁ, A. EBRINGEROVÁ</i> . . . . .	114
93	3Po-Po32: POLYMERNÍ KONJUGÁTY PRO KOMBINOVANOU TERAPII NÁDOROVÝCH ONEMOCNĚNÍ <i>H. KRAKOVIČOVÁ, K. ULBRICH, T. ETRYCH</i> . . . . .	114
94	3Po-Po33: OPTIMIZATION OF CONDITIONS TO SUPPRESS SYNERESIS AND SWELLING OF ALGINATE GELS <i>Z. KRONEKOVÁ, M. DANKO, I. KRUPA, I. LACÍK</i> . . . . .	115

95	3Po-Po34: PŘÍPRAVA A BIOLOGICKÁ AKTIVITA NOVÝCH 5-SUBSTITUOVANÝCH URACILŮ <i>S. KŘUPKOVÁ, J. HLAVÁČ, L. SPÁČILOVÁ</i> . . . . .	115
96	3Po-Po35: BIODISTRIBUCE TERMORESPONSIVNÍHO POLYMERU ZNAČENÉHO 13II V MYŠÍM ORGANISMU <i>J. KUČKA, M. HRUBÝ, J. KOZEMPEL, O. LEBEDA</i> . . . . .	116
97	3Po-Po36: SYNTÉZA 6A,6D-DISULFANYL-DERIVÁTU A-CYKLODEXTRINU A JEHO VYUŽITÍ PRO PŘÍPRAVU CYKLODEXTRINOVÉHO DUPLEXU. <i>L. KUMPRECHT, M. BUDĚŠÍNSKÝ, T. KRAUS</i> . . . . .	116
98	3Po-Po37: NEW CANCEROSTATICS AND ANTI-ANGIOGENICS POSSESSING PYRANO[3,2-C]CHROMEN-2(5H)-ONE LEADING STRUCTURE - THE SYNTHESIS AND BIOLOGICAL ACTIVITY <i>L. KUŠNIEROVÁ, S. KOVÁČOVÁ, M. ŠEBESTA, A. BOHÁČ, M. LÁCOVÁ, M. SALIŠOVÁ</i> . . . . .	117
99	3Po-Po38: TEORETICKÉ STUDIUM KOMPLEXACE POLYFLUOROVANÝCH TRIPYRAZOLYLMETHANŮ <i>J. KVÍČALA, M. RYBÁČKOVÁ, M. SKALICKÝ, P. BEČVAŘÍK</i> . . . . .	117
100	3Po-Po39: ELECTROGRAFTING OF POLYMERS ONTO ELECTROCONDUCTIVE SUBSTRATE AS A TOOL FOR FORMATION OF NON-BIOFOULING SURFACES FOR BIOMEDICAL APPLICATIONS <i>M. STACH, P. KASÁK, I. LACÍK</i> . . . . .	118
101	3Po-Po40: ENCAPSULATION OF ISLETS OF LANGERHANS IN POLYMERIC MICROCAPSULES <i>G. KOLLÁRIKOVÁ, I. LACÍK, V. ŠTRBÁK, Z. BAČOVÁ, D. HUNKELER, M. QI, J. OBERHOLZER, P. MICHALKA, D. CHORVÁT JR., J. PODSKOČOVÁ</i> . . . . .	119
102	3Po-Po41: SYNTÉZA ORGANICKÉHO INHIBÍTORA ANGIOGENÉZY - POTENCIÁLNĚHO LIEČIVA S ANTITUMOROVOU AKTIVITOU <i>L. LINTNEROVÁ, A. BOHÁČ, M. SALIŠOVÁ</i> . . . . .	119
103	3Po-Po42: STRUCTURE, ELECTRONIC AND OPTICAL CHARACTERIZATION OF OLIGOTHIOPHENES TERMINATED WITH (9H-FLUOREN-9-YLIDENE)METHYL CHROMOPHORES <i>V. LUKEŠ, M. MATIS, D. VÉGH, P. HRDLOVIČ, V. LAURINC</i> . . . . .	120
<b>20:00–00:00</b>	<b>Postery – sekcia 4</b>	
104	4Po-Po1: METHANOLOVÉ PALIVOVÉ ČLÁNKY VE VÝUCE CHEMIE <i>P. OPATRŇY, M. BÍLEK</i> . . . . .	120
105	4Po-Po2: PŘÍRODNÍ VĚDY HRAVĚ ANEB MINIJARMARK CHEMIE, FYZIKY A MATEMATIKY <i>R. MENZELOVÁ, V. FADRŇA, V. MAIER, L. KVÍTEK</i> . . . . .	121
106	4Po-Po3: NENÍ DŮLEŽITÉ VYHRÁT, ALE STÁT SE VĚDCEM <i>R. FILIPOVÁ, P. BANÁŠ, M. OTYEPKA, T. NEVĚČNÁ, L. KVÍTEK</i> . . . . .	122
107	4Po-Po4: CHEMIE PRO VŠECHNY ANEB JAK INOVOVAT KURIKULUM VŠEOBECNÉHO CHEMICKÉHO VZDĚLÁVÁNÍ <i>M. BÍLEK</i> . . . . .	122
108	4Po-Po5: ELECTROLYSIS - FROM COMPUTER ANIMATION TO REAL EXPERIMENT <i>Z. MELICHOVÁ, Š. BUDZÁK, I. NAGYOVÁ</i> . . . . .	123
109	4Po-Po6: CHEMIE - MÁM JI RÁD, NEMÁM JI RÁD <i>V. FADRŇA, R. MENZELOVÁ, M. DOPITA, H. GRECMANOVÁ, L. KVÍTEK</i> . . . . .	123
110	4Po-Po7: PŘÍRODOVĚDNÉ KROUŽKY NA STŘEDNÍCH ŠKOLÁCH OLOMOUCKÉHO KRAJE <i>P. TARKOWSKI, P. CANKAŘ, L. ZAJONCOVÁ, L. KVÍTEK</i> . . . . .	124
111	4Po-Po8: PŘÍRODOVĚDNÉ EXPERIMENTY - INTEGRACE PŘÍRODOVĚDNÝCH POJMŮ VE VÝUCE CHEMIE, FYZIKY, BIOLOGIE <i>M. KLEČKOVÁ, R. HOLUBOVÁ</i> . . . . .	124
<b>20:00–00:00</b>	<b>Postery – sekcia 5</b>	
112	5Po-Po1: VSTUP ŤAŽKÝCH KOVOV DO PŮDY APLIKÁCIU BIOKALU <i>T. TÓTH, P. LAZOR, A. VOLLMANNOVÁ, J. TOMÁŠ, K. JOMOVÁ, J. ČÉRY</i> . . . . .	125

113	5Po-Po2: ÚČINOK ODTRIEDENEJ HOREČNATEJ HORNINY NA ZMENU PÔDNEJ REAKCIE <i>J. TOMÁŠ, J. MUSILOVÁ, A. VOLLMANNOVÁ, K. JOMOVÁ</i> . . . . .	125
114	5Po-Po3: ÚČINOK KADMIA NA NIEKTORÉ UKAZOVATELE VÝŽIVOVEJ HODNOTY V HL'UZÁK LUL'KA ZEMIAKOVÉHO <i>J. MUSILOVÁ, J. BYSTRICKÁ, A. VOLLMANNOVÁ, J. TOMÁŠ, A. HRUŠKOVIČOVÁ</i> . . . . .	126
115	5Po-Po4: VSTUP KADMIA DO SÓJE VO VZŤAHU K PRÍJMU ZINKU <i>J. BYSTRICKÁ, J. MUSILOVÁ, A. VOLLMANNOVÁ</i> . . . . .	127
116	5Po-Po5: RIZIKO VSTUPU ZINKU, KADMIA, MEDI A OLOVA DO POTRAVOVÉHO REŤAZCA V REGIÓNE S METALICKOU ZÁŤAŽOU PÔDY <i>A. VOLLMANNOVÁ, J. BYSTRICKÁ, L. LAHUČKÝ, T. TÓTH, K. JOMOVÁ</i> . . . . .	127
117	5Po-Po6: ČO OVPLYVŇUJE KVALITU OVZDUŠIA V MESTE NITRA? <i>J. DUBAJOVÁ, Z. KLÓŠLOVÁ, Z. VASSANYI, O. HEGEDUS</i> . . . . .	128
118	5Po-Po7: VYLUHOVATELNOST ŤEŽKÝCH KOVŮ Z VZORKŮ VRB POUŽITÝCH PRO FYTOREMEDIACI <i>M. ŠYC, M. POHOŘELÝ, M. HOMOLOVÁ, M. PUNČOCHÁŘ</i> . . . . .	129
119	5Po-Po8: DISTRIBUCE ŤEŽKÝCH KOVŮ PŘI FLUIDNÍM SPALOVÁNÍ VRB POUŽITÝCH PRO FYTOREMEDIACI KONTAMINOVANÝCH PŮD <i>M. POHOŘELÝ, M. ŠYC, J. HABART, P. TLUSTOŠ, K. SVOBODA, M. PUNČOCHÁŘ</i> . . . . .	129
120	5Po-Po9: VPLYV VYBRANÉHO PREBIOTIKA NA SENZORICKÉ VLASTNOSTI MLIEČNE FERMENTOVANÝCH KAPUSTOVÝCH ŠTIAV <i>I. ŠIMONOVÁ, J. KAROVIČOVÁ, M. GREIFOVÁ, K. ORAVCOVÁ</i> . . . . .	129
121	5Po-Po10: ÚČINNOSTĚ KOMPLEXOV KOVŮ S HETEROCYKlickým N-DONOROVÝM LIGANDOM - NIKOTÍNAMIDOM (NIA) NA SLADKOVODNÉ RIASY <i>A. FARGAŠOVÁ, I. ONDREJKOVIČOVÁ</i> . . . . .	130
122	5Po-Po11: ENVIRONMENTÁLNE ÚČINKY STAREJ BANSKEJ ČINNOSTI V ŠTIAVNICKÝCH VRCHOCH NA POĽNOHOSPODÁRSTVO IPEĽSKÉHO REGIÓNU <i>D. BAJČAN, J. TOMÁŠ, T. TÓTH, L. HARANGOZÓ, J. ČÉRY</i> . . . . .	131
123	5Po-Po12: VPLYV SÍRY NA FYTOTOXICITU ARZÉNU V SLEDOVANÝCH POĽNOHOSPODÁRSKYCH PLODINÁCH <i>R. STANOVIČ, L. HARANGOZÓ, J. ÁRVAY, J. ČÉRY</i> . . . . .	131
124	5Po-Po13: HODNOCENÍ KAKAOVÉHO PRÁŠKU POMOCÍ VÍCEROZMĚROVÉ ANALÝZY DAT <i>A. VESELÁ, M. MAREŠOVÁ, M. SUCHÁNEK, A. SYNITSYA, J. COPIKOVA</i> . . . . .	132
125	5Po-Po14: USE OF L-ASPARAGINASE FOR ACRYLAMIDE LEVEL REDUCTION IN POTATO FRIED PRODUCTS. <i>K. KUKUROVÁ, C. BENEŠOVÁ, A. BEDNÁRIKOVÁ, Z. CIESAROVÁ</i> . . . . .	133
126	5Po-Po15: POROVNÁNÍ STUPNĚ VĚTVENÍ A ZASTOUPENÍ GLYKOSIDOVÝCH VAZEB BETA-GLUKANŮ RŮZNÉHO PŮVODU <i>M. NOVÁK, B. KASÍKOVÁ, J. COPIKOVA</i> . . . . .	133
127	5Po-Po16: ŠTÚDIUM SEKUNDÁRNÝCH METABOLITOV IZOLOVANÉHO ENDOFYTICKÉHO MIKROORGANIZMU FUSARIUM SP. <i>P. CIBÍKOVÁ, S. FIRÁKOVÁ, M. ŠTURDÍKOVÁ</i> . . . . .	133
128	5Po-Po17: INTERAKCE NANOŽELEZA S ŤEŽKÝMI KOVY A JEJICH VYUŽITÍ V SANAČNÍCH TECHNOLOGIÍCH <i>A. RODOVÁ, J. KUBRICHT, M. ČERNÍK</i> . . . . .	133
129	5Po-Po18: STANOVENIE KYSELINY MANDL'OVEJ V MOČI PRACOVNÍKOV EXPOZOVANÝCH STYRÉNU U VYBRANÝCH PRACOVNÝCH ČINNOSTÍ PRI VÝROBE SKLO-LAMINÁTOV . <i>M. POLÁKOVÁ</i> . . . . .	134
130	5Po-Po19: VÝVOJ RYCHLÉ A SPECIFICKÉ IMUNODETEKCE LISTERIA MONOCYTOGENES <i>M. BLAŽKOVÁ, L. FUKAL, P. RAUCH, K. DEMNEROVÁ</i> . . . . .	134
131	5Po-Po20: PRODUKCIA BIOAKTÍVNÝCH LÁTKŮ EPIFYTICKÝMI AKTINOMYCÉTAMI IZOLOVANÝMI Z TAXUS SP. <i>M. MARUNA, M. ŠTURDÍKOVÁ</i> . . . . .	135
132	5Po-Po21: VLIV ACYLGlyKOSIDŮ NA VYBRANÉ KMENY MIKROORGANISMŮ <i>T. KARLOVÁ, L. POLÁKOVÁ, J. ŠMIDRKAL</i> . . . . .	135

133	5Po-Po22: USAGE OF DNA REPAIR ENZYMES FOR DETECTION OF DNA BASE DAMAGE INDUCED BY MUTAGENIC AND GENOTOXIC COMPOUNDS <i>J. ČERVENĚ, Z. PAVLÍČKOVÁ, K. MALACHOVÁ, P. PEČINKA</i> . . . . .	136
134	5Po-Po23: PLANT PEPTIDASES PAPAINE AND BROMELAIN AND THEIR APPLICATION IN FOOD PROCESSING <i>E. SENDREJOVÁ, M. KARAMAC, A. KOSINSKA, R. AMAROWICZ, D. URMINSKÁ</i> . . . . .	136
135	5Po-Po24: DETECTION OF TAR IN PAVEMENT ASPHALT <i>P. PÁNEK, K. MALACHOVÁ, Z. LACNÝ, Z. PAVLÍČKOVÁ, L. GAZURKOVÁ</i> . . . . .	137
136	5Po-Po25: MOŽNOSTI STABILIZÁCIE JEDLÝCH TUKOV POČAS MIKROVLNNÉHO OHREVVU <i>L. JANÁČ, S. SEKRETÁR, Š. SCHMIDT, L. ZAHRADNÍKOVÁ</i> . . . . .	137
<b>20:00–00:00</b>	<b>Postery – sekcia 6</b>	
137	6Po-Po1: OXYCELULOZA JAKO NOVÁ POMOCNÁ LÁTKA PŘI FORMULACI TABLET <i>J. GAJZDIOK, Z. CHALUPOVÁ, R. MASTEIKOVÁ</i> . . . . .	138
138	6Po-Po2: EFFECT OF SURFACE MODIFICATION OF PET FIBRE MATERIALS TO THEIR MECHANICAL PROPERTIES <i>A. MURÁROVÁ, S. PODOBEKOVÁ, M. JAMBRICH</i> . . . . .	139
139	6Po-Po3: VÝVOJ NOVÉ TECHNOLOGIE PRO PŘÍPRAVU PERORÁLNÍCH LÉKOVÝCH FOREM VYŠŠÍCH GENERACÍ <i>D. VETCHY, L. ZEDKOVÁ, M. ŠVARCOVÁ, M. RABIŠKOVÁ</i> . . . . .	139
140	6Po-Po4: ROZKLADY KVARTERNÍ BÁZE ODVOZENÉ OD N,N-DIMETHYL-2-AMINOETHANOLU <i>M. ZAPLETAL, J. TREJBAL, M. PETRISKO, J. PAŠEK</i> . . . . .	140
141	6Po-Po5: MODELOVÝ POPIS REAKCE OXIDU ZINEČNATÉHO SE SULFANEM ZAHRNUJÍCÍ POROZITU PRODUKTU <i>P. ČERMÁK, V. GLASER, J. VÍDENSÝ, I. SEDLÁŘOVÁ, V. FÍLA</i> . . . . .	140
142	6Po-Po6: ANALYZÁTOR PRO RYCHLÉ STANOVENÍ DEHTŮ V PLYNU ZE ZPLYŇOVÁNÍ BIOMASY <i>P. KAMENÍKOVÁ, S. SKOBLJA, M. VOSECKÝ, M. POHOŘELÝ, M. PUNČOCHÁŘ, B. KOUTSKÝ</i> .	141
143	6Po-Po7: SIMS INVESTIGATION OF NICKEL SILICIDE CONTACT LAYERS <i>A. VINCZE, A. ŠATKA, R. SRNÁNEK, D. DONOVAL</i> . . . . .	141
144	6Po-Po8: MĚŘENÍ POVRCHU PALLADIOVÝCH NOSIČOVÝCH KATALYZÁTORŮ CHEMISORPČNÍ TECHNIKOU <i>J. PATERA, J. KRUPKA, J. PAŠEK</i> . . . . .	142
145	6Po-Po9: PROJEKT NANOMEMPRO <i>Z. CÍLOVÁ, V. FÍLA, B. BERNAUER, M. LHOTKA</i> . . . . .	142
146	6Po-Po10: ÚPRAVA SLOŽENÍ PLYNU ZE ZPLYŇOVÁNÍ BIOMASY A ODPADNÍCH PLASTŮ <i>M. VOSECKÝ, M. POHOŘELÝ, P. KAMENÍKOVÁ, S. SKOBLJA, M. PUNČOCHÁŘ</i> . . . . .	142

#### 4. 9. 2007 (Utorok)

##### 08:30–09:20 Pozvané prednášky

08:30	COORDINATION AND CATALYTIC BEHAVIOUR OF FERROCENE ALKENYLPHOSPHINES <i>P. ŠTĚPNIČKA</i> . . . . .	143
-------	--	-----

##### 08:30–09:20

08:30	ÚLOHA POLYNENASÝTENÝCH MASTNÝCH KYSELÍN V PREVENCIÍ NIEKTORÝCH CIVILIZAČNÝCH OCHORENÍ <i>J. ŠAJBIDOR</i> . . . . .	143
-------	---	-----

##### 09:20–09:25 Presun

##### 09:25–12:25 Prednášky – sekcia 1

09:25	MOLEKULÁRNÍ SIMULACE A JEJICH ULOHA V CHEMII <i>I. NEZBEDA</i> . . . . .	144
-------	---	-----



09:50	TERMODYNAMICKÉ OBMEDZENIA PRI INTERPRETÁCII MERANÍ A VÝPOČTOV JEDNOTLIVÝCH MOLEKÚL (BIO)POLYMÉROV <i>T. BLEHA, P. CIFRA</i> . . . . .	144
<b>10:15</b>	<b>Prestávka – občerstvenie</b>	
10:45	EVALUATION OF THE EFFICACY OF TWO DERIVATISATION AGENTS IN PYROLYSIS-GC/MS ANALYSIS OF ALKYD CAR PAINTS FOR FORENSIC PURPOSES <i>J.M. MILCZAREK, J. ZIĘBA-PALUS, P. KOŚCIELNIAK</i> . . . . .	145
11:10	CHARACTERISATION OF HOLLOW GELULAR BEADS AND MOLECULAR IMPRINTED POLYMERS BY MEANS OF DIFFERENT ANALYTICAL METHODS <i>M.M. ZAITZ, E. WITEK, E. BORTEL, A. TELK, J.M. MILCZAREK, B. DUDEK</i> . . . . .	145
11:35	VYUŽITÍ ELEKTROD Z PASTOVÝCH AMALGÁMŮ VE VOLTAMETRII <i>B. YOSYPCHUK</i> . . . . .	146
<b>09:25–12:25</b>	<b>Prednášky – sekcia 2</b>	
09:25	NESTEROIDNÉ MEĎNATÉ ANTIFLOGISTIKÁ <i>M. MELNÍK</i> . . . . .	146
09:50	SYNTHESIS, SPECTRAL AND MAGNETIC PROPERTIES AND CRYSTAL STRUCTURES OF COPPER(II) COMPLEXES WITH HETEROCYCLIC ACIDS <i>P. SEGL'A, D. MIKLOŠ, J. MONCOL', J. ŠVOREC, V. KUCHANTANIN, J. LAZORÍK, M. MELNÍK</i> . . . . .	146
<b>10:15</b>	<b>Prestávka – občerstvenie</b>	
10:45	NOVÉ METALOFENAMÁTY A ICH BIOLOGICKÉ ÚČINKY <i>D. HUDECOVÁ, L. KRUPKOVÁ, Š. LORINZ, M. MELNÍK</i> . . . . .	147
11:10	A BRIDGING ABILITY OF N,N-DIETHYLNICOTINAMIDE LIGAND IN CARBOXYLATO-COPPER(II) COMPLEXES. <i>J. MONCOL', J. KAVALIROVÁ, Z. REPICKA, L. MARTIŠKA, D. MIKLOŠ, D. VALIGURA</i> . . . . .	148
11:35	ŠTRUKTÚRA A VLASTNOSTI NITROBENZOÁTOMEĎNATÝCH KOMPLEXOV S NIKOTÍNAMIDOM <i>Z. VASKOVÁ, P. STACHOVÁ, J. MONCOL', M. KORABIK, M. MAZÚR, D. VALIGURA</i> . . . . .	148
12:00	ŠTÚDIUM KARBOXYLÁTOMEĎNATÝCH KOMPLEXOV A ICH ADUKTOV S BENZTIAZOLOVÝM LIGANDOM. <i>M. PAJTÁŠOVÁ, D. ONDRUŠOVÁ, G. RUDINSKÁ, V. PAVLÍK, V. JORÍK, M. KOMAN</i> . . . . .	148
<b>09:25–10:45</b>	<b>Prednášky – sekcia 3</b>	
09:25	POLYFLUORALKYLOVANÉ DIDUSÍKATÉ PĚTIČLENNÉ HETEROCYKLY JAKO INTERMEDIÁTY PRO FLUOROVOU CHEMIU <i>J. KVÍČALA, M. SKALICKÝ, M. RYBÁČKOVÁ, O. KYSILKA, K. ŠIGUT, M. BABUNĚK, M. HOLAN, J. PATEROVÁ, J. POLOMSKÝ</i> . . . . .	149
09:50	VYUŽITÍ POLARIZOVANÝCH ETHYLENŮ A 4-SUBSTITUOVANÝCH BENZENDIAZONIUM-TETRAFENYLBORÁTŮ PŘI SYNTÉZE HETEROCYKLIKÝCH SLOUČENIN <i>M. SVOBODOVÁ, J. BÁRTA, L. ŠTRUNCOVÁ, P. ŠIMŮNEK, V. BERTOLASI, A. RŮŽIČKA, V. MACHÁČEK, A. LYČKA</i> . . . . .	149
<b>10:15</b>	<b>Prestávka – občerstvenie</b>	
10:45	FORMATION OF THIOUREAS BY REACTION OF ISOTHIOCYANATES WITH WEAKLY BASIC OR BETAINE AMINES PROMOTED BY DMAP <i>J. ŠIMBERA, P. PAZDERA</i> . . . . .	150
11:10	SYNTÉZA PYRIMIDINOVÝCH A PURINOVÝCH NUKLEOSIDŮ A NUKLEOTIDŮ SE ZAMĚŘENÍM NA BIOLOGICKOU AKTIVITU <i>L. SPÁČILOVÁ, J. HLAVÁČ, M. HAJDÚCH, P. DŽUBÁK, A. HOLÝ, M. SCHINKMANOVÁ</i> . . . . .	150
11:35	BEHAVIOUR OF ENAMIDOMALONATES AND ENAMINOMALONATES UNDER VARIOUS REDUCTIVE CONDITIONS AND THEIR UTILIZATION IN SYNTHESIS OF <i>T. SOLČAN, P. JAKUBEC, V. MILATA</i> . . . . .	151
<b>09:25–12:00</b>	<b>Prednášky – sekcia 4</b>	
09:25	ASPEKTY HISTORICKÉHO VÝVOJE CHEMICKÝCH VÝROB VE VÝUCE CHEMIE <i>M. KRAITR, V. RICHTR, V. SIROTEK, J. ŠTROFOVÁ</i> . . . . .	152

09:50	MODERNIZÁCIA OBSAHU UČIVA CHÉMIE V ZÁKLADNÝCH ŠKOLÁCH A GYM-NÁZIÁCH NA SLOVENSKU <i>P. SILNÝ</i> . . . . .	152
<b>10:15</b>	<b>Prestávka – občerstvenie</b>	
10:45	NOVÉ TECHNOLOGIE VO VÝUČBE CHÉMIE ZAMERANÉ NA POPULARIZÁCIU CHÉMIE <i>M. GANAJOVÁ, L. KUKL'OVÁ, M. KOŽURKOVÁ</i> . . . . .	152
11:10	BIOCHÉMIA V OTÁZKACH <i>K. JOMOVÁ, Z. JENISOVÁ, J. MUSILOVÁ, T. TÓTH</i> . . . . .	153
11:35	VĚDA JE ZÁBAVA ANEB POPULARIZACE PŘÍRODNÍCH VĚD NA PRVNÍM STUPNI ZÁKLADNÍCH ŠKOL <i>J. SOUKUPOVÁ, T. ŠTOSOVÁ, L. KVÍTEK, L. ZAJONCOVÁ, A. PANÁČEK</i> . . . . .	153
<b>09:25–12:00</b>	<b>Prednášky – sekcia 5</b>	
09:25	ZÍSKÁNÍ VODÍKU Z OBNOVITELNÝCH ZDROJŮ ENERGIE <i>O. PROKEŠ, A. DOUCEK, D. TENKRÁT</i> . . . . .	154
09:50	HYDROLÝZA LAKTÓZY V MLIEKU A SRVÁTKE POMOCOU IMOBILIZOVANEJ B-GALAKTOZIDÁZY VO FORME LENTIKATS® <i>H. HRONSKA, M. ROSENBERG, Z. GROSOVÁ, L. KRIŠTOFÍKOVÁ</i> . . . . .	154
<b>10:15</b>	<b>Prestávka – občerstvenie</b>	
10:45	SLOŽENÍ TRIACYLGLYCEROLŮ V TUKOVÝCH TĚLESECH ČMELÁKŮ <i>I. VALTEROVÁ</i> . . . . .	155
11:10	FÁZOVÉ PŘECHODY V KANDYTECH <i>J. COPIKOVA, A. VESELÁ, A. SYNITSYA, B. KASÍKOVÁ, J. MAIXNER, Z. GUSCHLOVÁ</i> . . . . .	155
11:35	STEREOSELEKTIVITA A KONFORMAČNÍ STABILITA HALOGENALKANDEHALO-GENASY DBJA Z BRADYRHIZOBIUM JAPONICUM USDA110 <i>R. CHALOUPKOVÁ, Z. PROKOP, M. STRAKOVÁ, Y. SATO, Y. NAGATA, J. DAMBORSKÝ</i> . . . . .	156
<b>09:25–12:25</b>	<b>Prednášky – sekcia 6</b>	
09:25	NOVÉ PROCESY A MATERIÁLY PRE CHEMICKÝ PRIEMYSEL <i>V. MACHO, M. KAVALA, M. OLŠOVSKÝ</i> . . . . .	156
09:50	MOŽNOSTI VYUŽITÍ GLYCERINU PŘI VÝROBĚ CHEMICKÝCH KOMODIT A KOMPONENT DO PALIV <i>J. KOLENA</i> . . . . .	157
<b>10:15</b>	<b>Prestávka – občerstvenie</b>	
10:45	THE STRUCTURE AND PROPERTIES OF FIBROUS MATERIALS BASED ON TYPE OF SYNTHETIC AND MICROBIAL FIBRES <i>E. BENČÍKOVÁ, K. ŠČASNÍKOVÁ, M. JAMBRICH, L. HAJDÚCHOVÁ, M. ŠIARNIK</i> . . . . .	157
11:10	SURFACE-ACTIVE, PHYSICO-CHEMICAL AND PERFORMANCE PROPERTIES OF HYDROPHOBICALLY MODIFIED CARBOXYMETHYLCELLULOSE DERIVATIVES <i>V. TOMANOVÁ, I. SROKOVÁ, A. MALOVÍKOVÁ, A. EBRINGEROVÁ</i> . . . . .	157
11:35	NÁHRADA KAUČUKOV V GUMÁRENSKÝCH ZMESIACH GUMOVOU DRVINOU <i>V. MACHO, B. CÍBIK, J. MICHÁLEK, M. OLŠOVSKÝ</i> . . . . .	158
12:00	VYUŽITIE PLAZMY NA MODIFIKÁCIU POVRCHU POLYETYLÉNU <i>M. ŠTEVIAR, I. NOVÁK, I. CHODÁK, M. ŠPÍRKOVÁ, M.M. CHEHIMI, J. MOSNÁČEK, A. KLEINOVÁ</i> . . . . .	158
<b>12:00–14:00</b>	<b>Obed</b>	
<b>14:00–18:00</b>	<b>Výlety</b>	
<b>18:00–20:00</b>	<b>Večera</b>	

**20:00–00:00 Postery – sekcia 1**

1	1Po-Ut1: PRŮTOKOVÁ ANALÝZA AGROCHEMIKÁLÍ S ELEKTROCHEMICKOU DETEKČÍ NA STŘÍBRNÉ PEVNÉ AMALGÁMOVÉ ELEKTRODĚ <i>J. FISCHER, J. BAREK, J. ZIMA, K. PECKOVÁ, B. YOSYPCHUK, T. NAVRÁTIL . . . . .</i>	159
2	1Po-Ut2: POLAROGRAFICKÉ A VOLTAMETRICKÉ STANOVENÍ SUBMIKROMOLÁRNÍCH MNOŽSTVÍ GENOTOXICKÉHO 5-NITROBENZIMIDAZOLU <i>V. VYSKOČIL, D. DEÝLOVÁ, J. MUSILOVÁ, K. PECKOVÁ, J. BAREK . . . . .</i>	159
3	1Po-Ut3: IDENTIFIKACE DEZINFEKČNÍCH LÁTEK A ROZTOKŮ POUŽÍVANÝCH VE ZDRAVOTNICKÝCH ZAŘÍZENÍCH V KONTAKTU S TEXTILNÍMI MATERIÁLY <i>M. KLUČÁKOVÁ, I. HELÍSKOVÁ . . . . .</i>	160
4	1Po-Ut4: ANALYSIS OF MICROORGANISMS BY CAPILLARY ELECTROPHORESIS <i>O. RYPAROVÁ, J. PETR, J. ZNALEZIONA, V. MAIER, M. KOWALSKA, J. ŠEVČÍK . . . . .</i>	161
5	1Po-Ut5: STUDIUM SPECIACE U(VI) METODOU TRLFS <i>E. HOMZOVÁ . . . . .</i>	161
6	1Po-Ut6: GAS CHROMATOGRAPHIC DETERMINATION OF D- AND L-AMINO ACIDS PRODUCED BY CYANOBACTERIA ON CHIRASIL-VAL AFTER DERIVATIZATION WITH PENTAFLUOROPROPYL CHLOROFORMATE <i>H. ZAHRADNÍČKOVÁ, P. HUŠEK, P. ŠIMEK, P. HARTVICH, B. MARŠÁLEK, I. HOLOUBEK . . . . .</i>	161
7	1Po-Ut7: INFLUENCING OF PROPERTIES OF MIXED OXIDE CATALYSTS USING <i>D. KOBLIHA . . . . .</i>	162
8	1Po-Ut8: STANOVENÍ VOLNÝCH PLAZMATICKÝCH METANEFRIŇŮ VYSOKOÚČINNOU KAPALINOVOU CHROMATOGRAFIÍ S ELEKTROCHEMICKOU DETEKČÍ <i>A. VRÁNKOVÁ, Z. JŮZOVÁ, J. WIDIMSKÝ, JR., T. ZELINKA, J. ŠKRHA . . . . .</i>	162
9	1Po-Ut9: ELECTROCHEMICAL DNA-BASED BIOSENSORS WITH NANOSTRUCTURED SURFACE <i>D. ŠIMKOVÁ, J. GALANDOVÁ, G. ZIYATDINOVA, J. LABUDA . . . . .</i>	162
10	1Po-Ut10: ELEKTRÓN-FONÓNOVÁ INTERAKCIA V KOMPOZITNÝCH KOVOVÝCH NANOČASTICIACH <i>A. GAÁL . . . . .</i>	163
11	1Po-Ut11: VOLTAMETRICKÉ STANOVENÍ ADRENALINU NA MODIFIKOVANÉ UHLÍKOVÉ PASTOVÉ ELEKTRODĚ <i>Z. JEMELKOVÁ, J. ZIMA, J. BAREK, I. ŠVANCARA . . . . .</i>	163
12	1Po-Ut12: VYUŽITÍ HOMOGENÁTU PRO STANOVENÍ AKTIVITY ENZYMU RUBISCO PRO DALŠÍ ANALÝZY <i>J. KALINA, M. DUCIUCOVÁ, R. BUKOVSKÁ, O. URBAN . . . . .</i>	164
13	1Po-Ut13: STANOVENÍ 5-NITROCHINOLINU A 5-AMINOCINOLINU POMOCÍ PRŮTOKOVÉ INJEKČNÍ ANALÝZY S ELEKTROCHEMICKOU DETEKČÍ <i>I. JIRÁNEK, J. BAREK, Z. KRÁLOVÁ, K. PECKOVÁ . . . . .</i>	164
14	1Po-Ut14: POROVNÁNÍ ELEKTROCHEMICKÝCH VLASTNOSTÍ KOMERČNĚ DODÁVANÝCH BOREM DOPOVANÝCH DIAMANTOVÝCH ELEKTROD <i>J. MUSILOVÁ, J. BAREK, K. PECKOVÁ, V. VYSKOČIL, J. FISCHER . . . . .</i>	165
15	1Po-Ut15: BEZROZKLADOVÁ SPEKTROMETRICKÁ ANALÝZA KERAMICKÉHO MATERIÁLU SIC - POROVNANIE DC-ARC-OES A ETV-ICP-OES METÓDY <i>V. BOKOVÁ, J. HASSLER, K. FLÓRIÁN . . . . .</i>	165
16	1Po-Ut16: CHEMICKÉ ZBRANĚ - KONTROLA JEJICH ZÁKAZU <i>M. BLÁHOVÁ . . . . .</i>	166
17	1Po-Ut17: REDUKCE AMINONITROFENOLŮ NA BISMUTEM MODIFIKOVANÝCH ELEKTRODÁCH <i>H. DEJMKOVÁ, J. ZIMA, J. BAREK . . . . .</i>	166
18	1Po-Ut18: EXTRAKCE ESTERŮ KYSELINY FTALOVÉ Z VODY POMOCÍ MAGNETICKY MODIFIKOVANÉHO PFO <i>M. KANDELOVÁ, K. KOMÁREK, M. ELCNEROVÁ, I. ŠAFAŘÍK, M. ŠAFAŘÍKOVÁ . . . . .</i>	166
19	1Po-Ut19: VYUŽITIE TENKOVRSSTVOVEJ COULOMETRICKEJ TITRÁCIE NA STANOVENIE DUSIČNANOV VO VODÁCH <i>S. HLÚBIKOVÁ, Z. HANKOVÁ, E. BEINROHR . . . . .</i>	167
20	1Po-Ut20: STUDIUM SPECIACE URANU V PROSTŘEDÍ SÍRANOVÝCH IONTŮ METODOU TRLFS <i>A. VETEŠNÍK, M. SEMELOVÁ, K. ŠTAMBERG, E. HOMZOVÁ, J. JOHN, D. VOPÁLKA . . . . .</i>	167

21	1Po-Ut21: VPLYV PH NA VEL'KOST' NANOČASTÍC STRIEBRA <i>M. HOLECOVÁ, L. KVÍTEK, T. NEVĚČNÁ</i> . . . . .	168
22	1Po-Ut22: VYUŽITÍ ANALÝZY OBRAZU, NUKLEÁRNÍ MAGNETICKÉ REZONANCE A BRDIČKOVY REAKCE PRO STUDIUM VLIVU TĚŽKÝCH KOVŮ NA EMBRYONÁLNÍ SMRKOVÉ KULTURY <i>J. BALOUN, K. STEJSKAL, V. DIOPAN, V. SHESTIVSKA, V. ADAM, R. MIKELOVÁ, J. ZEHNÁLEK, L. HAVEL, L. TRNKOVÁ, K. BARTUŠEK, R. KIZEK</i> . . . . .	168
23	1Po-Ut23: POROVNÁNÍ SPEKTROFOTOMETRICKÉ A ELEKTROCHEMICKÉ METODY STANOVENÍ ENZYMU UREÁZY <i>O. KRYŠTOFOVÁ, J. HRADECKÝ, F. HLÁVKA, J. ZEHNÁLEK, L. HAVEL, L. TRNKOVÁ, R. KIZEK</i>	169
24	1Po-Ut24: ANALYTICKÁ KALIBRÁCIA AKO SÚČASŤ OPTIMALIZÁCIE NOVEJ TANDEMOVEJ SPEKTROSKOPICKEJ METÓDY <i>S. RUZICKOVA, K. KARDOŠOVÁ</i> . . . . .	169
25	1Po-Ut25: NEW DESIGN OF FLOW - THROUGH ELECTROCHEMICAL CELL FOR ELECTROCHEMICAL HG - AAS <i>J. HRANÍČEK, V. ČERVENÝ, P. RYCHLOVSKÝ</i> . . . . .	170
26	1Po-Ut26: FLUORESCENCE DYNAMICS OF COUMARIN: SOLVATED IONS VERSUS CHARGED LAYERS <i>M. ŽITŇAN</i> . . . . .	170
27	1Po-Ut27: PRÍPRAVA A VLASTNOSTI Zn(II) KOMPLEXOV S METYLPYRIDYLKAR- BAMÁTOM <i>Z. BUJDOŠOVÁ, K. GYORYOVA, D. HUDECOVÁ, J. KOVÁŘOVÁ</i> . . . . .	171
28	1Po-Ut28: FAST AND ACCURATE CALCULATION OF INTERMOLECULAR INTER- ACTION ENERGIES AND GEOMETRIES - DENSITY FUNCTIONAL THEORY AUG- MENTED WITH AN EMPIRICAL DISPERSION TERM - DFT-D <i>P. JUREČKA, J. ČERNÝ, P. HOBZA</i> . . . . .	171
29	1Po-Ut29: VYUŽITIE CYKLICKEJ VOLTAMPÉROMETRIE PRE ŠTÚDIUM ELEKTRO- CHEMICKÝCH VLASTNOSTÍ FEXOFENADÍNU A TERFENADÍNU <i>M. VALACH, J. KATRLÍK</i> . . . . .	172
30	1Po-Ut30: NAKLÁDÁNÍ S PIVOVARSKÝMI ODPADY A MOŽNOST JEJICH VYUŽITÍ <i>T. ZOUFALÝ</i> . . . . .	172
31	1Po-Ut31: COMPUTER AIDED PREDICTION OF LUNG MALIGNITY <i>V. MRÁZOVÁ, J. MOCÁK, E. VARMUSOVÁ, D. KAVKOVÁ</i> . . . . .	173
32	1Po-Ut32: STUDY OF ANTITUBERCULOTIC ACTIVITY WITH LIPOPHILICITY, NMR SHIFTS AND MOLECULE PROPERTIES <i>T. ĎURČEKOVÁ, P. NEMEČEK, J. MOCÁK, J. LEHOTAY, K. HROBOŇOVÁ, K. WAISSER</i> . . . . .	173
33	1Po-Ut33: FULERÉN AKO MATRICA V HMOTNOSTNEJ SPEKTROMETRII SEKUNDÁRNÝCH IÓNOV <i>M. STUPAVSKÁ, M. ARANYOSIOVÁ, D. VELIČ</i> . . . . .	174
34	1Po-Ut34: SOUČASNÝ ZÁCHYT MĚDI VE FORMĚ KATIONTU A MOLYBDENU VE FORMĚ OXOANIONTU NA SELEKTIVNÍCH IONEXECH <i>Z. ASRESAHEGNOVÁ, L. JELÍNEK, H. PARSCHOVÁ, E. MIŠTOVÁ</i> . . . . .	174
35	1Po-Ut35: SIMS CHARACTERIZATION OF HYDROFOBIZED AND CARBONIZED ZE- OLITES <i>J. OSLANSKÁ, M. ARANYOSIOVÁ, E. CHMIELEWSKA, D. VELIČ</i> . . . . .	175
36	1Po-Ut36: A NEW MODEL FOR CONTROLLING THE ENZYMIC HYDROLYSIS FOR PRODUCING SURROGATES ON THE BASIS OF BARLEY AND OTHER GRAINS <i>T. ZOUFALÝ, P. BRYNYCH</i> . . . . .	175
37	1Po-Ut37: APPLICATION OF THE SINGLE-STEP APPROXIMATION <i>P. ŠIMON</i> . . . . .	176
<b>20:00-00:00</b>	<b>Postery – sekcia 2</b>	
38	2Po-Ut1: MONOPEROXOKOMPLEXY VANÁDU(V) S BIOLOGICKY VÝZNAMNÝMI O A N DONOROVÝMI LIGANDAMI. <i>S. PACIGOVÁ, M. SIVÁK, R. GYEPES</i> . . . . .	176
39	2Po-Ut2: ELECTROCHEMICAL BEHAVIOUR OF THE SYSTEM LiF — (CaF <sub>2</sub> ) — La <sub>2</sub> O <sub>3</sub> <i>J. JURISOVÁ, M. AMBROVÁ, V. DANIELIK</i> . . . . .	177

40	2Po-Ut3: INTERKALACE FYLOSILIKÁTU CHELATONEM A JEHO SORPČNÍ VLASTNOSTI <i>J. SEIDLEROVÁ, M. VALÁŠKOVÁ, M. NOVÁČKOVÁ</i> . . . . .	177
41	2Po-Ut4: MONTMORILLONITE MODIFIED WITH SILVER: PREPARATION AND TESTING OF ANTIBACTERIAL ACTIVITY. <i>P. PRAUS, K. MALACHOVÁ, M. TURICOVÁ, Z. PAVLÍČKOVÁ</i> . . . . .	178
42	2Po-Ut5: ABLACE A LEPTÁNÍ POLYMERŮ MODIFIKOVANÝCH PLASMOU <i>J. SIEGEL, A. ŘEZNÍČKOVÁ, R. KALOUSKOVÁ, P. SLEPIČKA, V. ŠVORČÍK</i> . . . . .	178
43	2Po-Ut6: VLASTNOSTI SMĚSNÝCH KRYSTALŮ <i>A. HOVORKOVA, D. BACHAN, Č. DRAŠAR, A. KREJČOVÁ, P. LOŠŤÁK</i> . . . . .	179
44	2Po-Ut7: KINETIKA FOTOINDUKOVANÝCH ZMĚN V TENKÝCH VRSTVÁCH AMORFNÍCH CHALKOGENIDŮ <i>A. FIŠEROVÁ</i> . . . . .	179
45	2Po-Ut8: VYSOKOTEPLTNÁ NEUTRÓNOVÁ PRÁŠKOVÁ DIFRAKČNÍ SÚSTAVA $\text{Na}_3\text{AlF}_6\text{-Al}_2\text{O}_3$ <i>M. KUCHARÍK</i> . . . . .	180
46	2Po-Ut9: ODSTRAŇOVÁNÍ OXIDŮ DUSÍKU ABSORPČNÍMI METODAMI <i>L. HORA</i> . . . . .	180
47	2Po-Ut10: CHARACTERIZATION AND DIFFERENTIATION OF KAOLINS FROM SELECTED CZECH DEPOSITS USING INFRARED SPECTROSCOPY AND THERMAL ANALYSIS <i>L. VACULÍKOVÁ, E. PLEVOVÁ</i> . . . . .	181
48	2Po-Ut11: OXOVANADIČNANY S KOMPLEXNÝMI KATIÓNY <i>L. KLIŠTINCOVÁ, P. SCHWENDT, E. RAKOVSKÝ</i> . . . . .	181
49	2Po-Ut12: MOŽNOSTI OVLIVNĚNÍ VELIKOSTI A DISTRIBUCE PÓRŮ A JEJICH VLIV NA VLASTNOSTI <i>V. BARTŮNEK, O. SMRČKOVÁ</i> . . . . .	182
50	2Po-Ut13: PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE MOLEKULÁRNÍCH HLINITOFOSFONÁTŮ <i>J. CHYBA, M. NEČAS, Z. MORAVEC, J. PINKAS</i> . . . . .	182
51	2Po-Ut14: VYUŽITÍ METOD SOL-GEL PŘI PŘÍPRAVĚ SUPRAVODIČŮ $\text{Bi(Pb)-Sr-Ca-Cu-O}$ <i>E. MÁJOVÁ, D. SÝKOROVÁ, O. SMRČKOVÁ, K. RUBEŠOVÁ</i> . . . . .	182
52	2Po-Ut15: ŠTVORCOVOPLANÁRNE DITHIOLÁTOVÉ KOMPLEXY $\text{Ni(II)}$ S N-DONOROVÝMI BIDENTÁTNÝMI LIGANDAMI <i>P. HERICH, J. KAMENÍČEK</i> . . . . .	183
53	2Po-Ut16: STUDIUM SLOUČENIN TYPU $\text{LnAlSn}_{2-x}\text{Cr}_2\text{O}_7$ <i>L. VÁLEK</i> . . . . .	183
54	2Po-Ut17: ZLOŽENIE A REDOX STAV HISTORICKÝCH SKIEL <i>A. PLŠKO, J. ŠULCOVÁ, L. BARILLOVÁ, D. STAŠŠÍKOVÁ, M. BIELICH, M. SAMUEL</i> . . . . .	183
55	2Po-Ut18: ŠTÚDIUM TEPLOTNÝCH ZMIEN PÓROVITEJ ŠTRUKTÚRY $\text{SiO}_2$ -AEROGÉLU <i>K. JESENÁK, M. VARGOVÁ, O. ŠAUŠA, V. MAJERNÍK, J. KRÍŠTIK, P. HUDEC</i> . . . . .	184
56	2Po-Ut19: ROUBOVÁNÍ POLYMERNÍCH FILMŮ POMOCÍ PLASMY <i>K. KOLÁŘOVÁ, V. ŠVORČÍK</i> . . . . .	184
57	2Po-Ut20: INTERAKCE VSMC S MODIFIKOVANÝM PE <i>N. KASÁLKOVÁ, K. KOLÁŘOVÁ, L. BAČÁKOVÁ, M. PAŘÍZEK, V. ŠVORČÍK</i> . . . . .	185
58	2Po-Ut21: ADSORPCE TOXICKÝCH OXOANIONTŮ $\text{Se(IV)}$ A $\text{Se(VI)}$ NA MODIFIKOVANÉ JÍLY <i>L. HERZOGOVÁ, B. DOUŠOVÁ, D. KOLOUŠEK, M. NOVOTNÁ, L. FUITOVA</i> . . . . .	185
59	2Po-Ut22: $\text{Ru(III)}$ -COMPLEXES INVOLVING BENZYL-DISUBSTITUTED DERIVATIVES OF 6-BENZYLAMINOPURINE. <i>K. ŠTEPÁNKOVÁ, M. MATIKOVÁ-MALÁROVÁ, Z. TRÁVNÍČEK</i> . . . . .	185
60	2Po-Ut23: CHALKOGENIDOVÁ SKLA $\text{Ga-Ge-Sb-Se}$ DOTOVANÁ $\text{Pr}^{3+}$ IONTY <i>P. ŠOURKOVÁ, B. FRUMAROVÁ, M. FRUMAR</i> . . . . .	186
61	2Po-Ut24: INTERAKČNÁ BENZOTRIAZOLU S RÔZNYMI MONOIONICKÝMI FORMAMI MONTMORILLONITU <i>M. SAPIETOVÁ, E. JÓNA, K. JESENÁK, P. BILLIK</i> . . . . .	186

62	2Po-Ut25: SYNTÉZA 8-NITRILIO KOBALT- BIS(1,2-DIKARBOLIDOVÉHO) (1-) AN- IONTU A NOVÝCH DUSÍKATÝCH DERIVÁTŮ Z NĚJ ODVOZENÝCH <i>M. KVÍČALOVÁ, J. PLEŠEK, V. ŠÍCHA, I. CÍSAŘOVÁ, B. GRÜNER</i> . . . . . 187	187
63	2Po-Ut26: TEXTURÁLNÍ PARAMETRY MEMBRÁN VYROBENÝCH Z UHELNÉ HMOTY <i>M. LHOTKA, V. FÍLA, I. KOUTNÍK</i> . . . . . 188	188
64	2Po-Ut27: VYSOKOTEPLTNÁ KLASIFIKÁCIA MONTMORILLONITU „KUNIPIA“ <i>J. HRACHOVÁ, M. VARGOVÁ, V.Š. FAJNOR</i> . . . . . 188	188
65	2Po-Ut28: ION-IMPLANTATION INTO CHROMIUM DOPING SILICATE GLASS <i>S. JANÁKOVÁ, B. ŠVEC OVÁ, J. ŠPIRKOVÁ, M. MÍKA, P. NEKVINDOVA, J. OSWALD, A. MACKOVÁ</i> 188	188
66	2Po-Ut29: STUDY OF ION-EXCHANGE PROCESSES IN GLASS SUBSTRATES USED FOR FABRICATION OF PLANAR OPTICAL WAVEGUIDES <i>B. ŠVEC OVÁ, J. ŠPIRKOVÁ, P. NEKVINDOVA, S. JANÁKOVÁ, M. MÍKA, F. LAHODNÝ</i> . . . . . 189	189
67	2Po-Ut30: PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE MEMBRÁN NA BÁZI TITANOSILIKÁTU <i>Z. CÍLOVÁ, V. FÍLA, M. LHOTKA</i> . . . . . 190	190
68	2Po-Ut31: SOLVATOMORFIE VINANU DIHYDROERGOTAMINU <i>M. ROBSTECKOVA, J. ČEJKA, A. JEGOROV</i> . . . . . 190	190
69	2Po-Ut32: ULTRASONIC ROUTE TO $\text{CoFe}_2\text{O}_4$ BY SONOLYSIS OF $\text{M}(\text{acac})_n$ COM- PLEXES <i>P. OSTRŽÍZEK, J. PINKAS, R. ZBOŘIL, P. BEZDIČKA</i> . . . . . 190	190
70	2Po-Ut33: OPTICKÉ VLASTNOSTI TENKÝCH VRSTEV $(\text{As}_2\text{Se}_3)_{80-x}(\text{As}_2\text{Te}_3)_x(\text{SnTe})_{20}$ <i>V. PARCHANSKI, B. FRUMAROVÁ, M. FRUMAR, M. HRDLIČKA</i> . . . . . 191	191
71	2Po-Ut34: KOMPLEXNÍ SLOUČENINY OBSAHUJÍCÍ $\text{Er}^{3+}$ A $\text{Yb}^{3+}$ VHODNÉ PRO PŘÍPRAVU OPTICKÝCH VLNOVODŮ <i>J. ONDRÁČKOVÁ, P. TŘEŠŇÁKOVÁ</i> . . . . . 192	192
72	2Po-Ut35: ANALÝZA TENKÝCH VRSTEV ZNO:AL PŘIPRAVENÝCH RF NAPRAŠO- VANÍM POMOCOU AFM A SIMS <i>D. HAŠKO, A. VINCZE, J. KOVÁČ, I. NOVOTNÝ</i> . . . . . 192	192
<b>20:00–00:00</b>	<b>Postery – sekcia 3</b>	
73	3Po-Ut1: PŘESMYKY 1-SUBST. 9B-HYDROXY-3,3A,5,9B-TETRAHYDRO-1H- IMIDAZO[4,5-C]CHINOLIN-2,4-DIONŮ. NEOČEKÁVANÁ CESTA K NOVÝM IN- DOLOVÝM A IMIDAZOLINONOVÝM DERIVÁTŮM <i>A. LYČKA, A. KLÁSEK</i> . . . . . 192	192
74	3Po-Ut2: VLIV ORGANICKÉ POVRCHOVÉ ÚPRAVY RUTILOVÉHO KALCINÁTU NA STABILITU SMĚSÍ PVC <i>L. MASTNÝ, R. KALOUSKOVÁ, Z. ŠRANK, M. PLEŠKOVÁ</i> . . . . . 193	193
75	3Po-Ut3: SYNTHESIS OF SELENADIAZOLOQUINOLONE DERIVATIVES AND THEIR UTILIZATION TOWARDS 7,8-DIAMINOQUINOLINE <i>M. BELLA, V. MILATA</i> . . . . . 193	193
76	3Po-Ut4: SLEDOVÁNÍ VLIVU TEPELNÉ HISTORIE FILMŮ PŘIPRAVENÝCH Z HY- DROLYSÁTU KOLAGENU NA JEJICH ROZPUSTNOST <i>P. MOKREJŠ, D. JANÁČOVÁ, M. MLÁDEK, F. LANGMAIER, K. KOLOMAZNÍK, V. VAŠEK, P. ŠUJAN</i> 194	194
77	3Po-Ut5: VLASTNOSTI FILMŮ Z HYDROLYSÁTŮ KOLAGENU <i>P. MOKREJŠ, D. JANÁČOVÁ, M. MLÁDEK, F. LANGMAIER, K. KOLOMAZNÍK, V. VAŠEK, L. VÁ- CLAVKOVÁ</i> . . . . . 194	194
78	3Po-Ut6: TERMICKÁ ANALÝZA BIODEGRADABILNÍCH FILMŮ <i>P. MOKREJŠ, D. JANÁČOVÁ, M. MLÁDEK, F. LANGMAIER, K. KOLOMAZNÍK, V. VAŠEK, L. VÁ- CLAVKOVÁ</i> . . . . . 195	195
79	3Po-Ut7: PREPARATION AND ANTIMYCOBACTERIAL ACTIVITY OF HYDRAZONO- FORMAMIDE DERIVATIVES OF ISONIAZID <i>J. MONREAL FÉRRIZ, J. VINŠOVÁ, A. IMRAMOVSKÝ, E. VAVŘÍKOVÁ</i> . . . . . 196	196
80	3Po-Ut8: DEVELOPMENT OF REGIOSELECTIVE ENZYMOLOGICAL FERULOYLATION OF SIMPLE SACCHARIDES <i>Z. MORÁVKOVÁ, M. MASTIHUBOVÁ</i> . . . . . 196	196
81	3Po-Ut9: AROMATIC NITROXIDES AND ALKOXYAMINES FOR LFRP. SYNTHESIS AND MOLECULAR MODELING. <i>J. MOSNÁČEK, J. KOLLÁR, J. KRONEK, D. RAČKO, C. KÓSA, M. DANKO</i> . . . . . 197	197

82	3Po-Ut10: ŠTÚDIUM MORFOLÓGIE A ELEKTRICKÝCH VLASTNOSTI POLYPYROLU PRIPRAVENÉHO V PRÍTOMNOSTI SÍRANU CERIČITÉHO K. MRAVČÁKOVÁ, M. OMASTOVÁ . . . . .	197
83	3Po-Ut11: REAKCE ŽLUČOVÝCH KYSELIN V MIKROVLNNÉM PROSTŘEDÍ: SELEKTIVNÍ DEFORMYLACE TRI-O-FORMYLCHOLOVÉ KYSELINY T.H. NGUYEN THI, D. ROČKOVÁ, P. DRAŠAR . . . . .	198
84	3Po-Ut12: POROVNANIE EFEKTIVITY RÔZNYCH PLNÍV NA BÁZE MONTMORILONITU PRE TERMOPLASTICKÚ A ELASTOMÉRNÚ MATRICU Z. NÓGELLOVÁ, J. HRACHOVÁ, I. CHODÁK . . . . .	198
85	3Po-Ut13: AMIDY ŽLUČOVÝCH KYSELIN VYTVOŘENÉ Z RŮZNYCH AMINŮ Z. NOVÁKOVÁ . . . . .	198
86	3Po-Ut14: VLASTNOSTI KOMPOZITOV SIC/POLYPYROL PRIPRAVENÝCHCH V PRÍTOMNOSTI ANIÓNOVÝCH TENZIDOV M. OMASTOVÁ, M. MIČUŠÍK, M. TRCHOVÁ, P. FEDORKO, M.M. CHEHIMI . . . . .	199
87	3Po-Ut15: SYNTÉZA A ANTIMYKOBAKTERIÁLNÍ AKTIVITA 2-ALKYLSULFANYL A 2-FENYLSULFANYLFENYLGUANIDINŮ. K. PALÁT, G. BRAUNEROVÁ, J. KAUSTOVÁ, U. MÖLLMANN, H.M. DAHSE . . . . .	199
88	3Po-Ut16: THE CROSS-LINKING POLYMERIZATION OF SELECTED N-SUBSTITUTED BIS ACRYLAMIDES DEFINED FOR DENTISTRY RESTORATIVE COMPOSITES. J. PAVLINEC, N. MOSZNER . . . . .	200
89	3Po-Ut17: SOFISTIKOVANÁ METODA VÝROBY 2,4-DICHLORBENZYLKYANIDU J. BĚLUŠA, J. ŠIMBERA, P. PAZDERA . . . . .	200
90	3Po-Ut18: ADICE ALDEHYDŮ NA VISÍCÍ VINYL KAPALNÝCH POLYBUTADIENŮ J. PODEŠVA, J. KOVÁŘOVÁ . . . . .	201
91	3Po-Ut19: SYNTÉZA NOVÝCH DERIVÁTŮ PACLITAXELU M. PŘIBYLOVÁ, M. DVOŘÁKOVÁ, T. VANĚK . . . . .	202
92	3Po-Ut20: SYNTÉZA A CYTOTOXICKÁ AKTIVITA NĚKTERÝCH 3-SUBSTITUOVANÝCH 1,2-DIHYDRO-CHINOXALIN-2-ONŮ N. PUDELOVÁ, I. FRYŠOVÁ, J. SLOUKA, M. HAJDŮCH . . . . .	202
93	3Po-Ut21: STEREOSELEKTIVNÁ SYNTÉZA POKROČILÉHO PREKURZORA PRE SYNTÉZU (+)-MYRIOCÍNU A JEHO ANALÓGOV J. RASCHMANOVÁ, M. MARTINKOVÁ, J. KNAP, J. GONDA . . . . .	203
94	3Po-Ut22: SYNTHESIS AND POTENTIAL APPLICATION OF AMINO(BORONOPHENYL)METHYLPHOSPHONIC ACIDS AS RECEPTORS FOR AMINO ACIDS AND SUGARS. A. RYDZEWSKA, P. MŁYNARZ, P. KAFARSKI . . . . .	203
95	3Po-Ut23: NOVEL SYNTHESIS OF POLYCYCLIC REVERSIBLE INTERCALATORS AND THEIR BIOLOGICAL ACTIVITY M. KOŽURKOVÁ, D. SABOLOVÁ, L. JANOVEC, H. PAULÍKOVÁ, P. KRISTIAN, Z. VANTOVÁ, M. BAJDICOVÁ, J. IMRICH . . . . .	204
96	3Po-Ut24: THE BINDING AFFINITIES OF N-(9-ACRIDINYLTHIOCARBAMOYL)AMINO ACIDS WITH PLASMID DNA D. SABOLOVÁ, M. KOŽURKOVÁ, P. KRISTIAN, I. DANIHEL, N. TOMÁŠKOVÁ, J. IMRICH . . . . .	204
97	3Po-Ut25: SPIROCYKLIZÁCIA 1-METOXYBRASINÍNU V PRÍTOMNOSTI SUBSTITUOVANÝCH ANILÍNŮV A. SALAYOVÁ, P. KUTSCHY, M. ZBUROVÁ, J. MOJŽIŠ, M. PILÁTOVÁ . . . . .	205
98	3Po-Ut26: HYDROPHOBICALLY MODIFIED PECTATES - NOVEL FUNCTIONAL BIOPOLYMERS V. SASINKOVÁ, A. MALOVÍKOVÁ, Z. HROMÁDKOVÁ, Š. MOZEŠ, I. SROKOVÁ, A. EBRINGEROVÁ . . . . .	206
99	3Po-Ut27: PŘÍPRAVA KERATINOVÉHO HYDROLYZÁTU A STANOVENÍ NĚKTERÝCH JEHO CHARAKTERISTIK S. SUKOP, P. MOKREJŠ, F. BUŇKA, V. KAŠPÁRKOVÁ, K. KOLOMAZNÍK . . . . .	206
100	3Po-Ut28: ANTIOXIDAČNÁ ÚČINNOSŤ OSAJÍNU, POMIFERÍNU A ICH SYNTETICKY PRIPRAVENÝCH IZOFORIEM F. ŠERŠEŇ, D. LOOS, M. DVORSKÁ, J. VANČO . . . . .	207
101	3Po-Ut29: SYNTÉZA A ANTIOXIDAČNÉ VLASTNOSTI N-(4-HYDROXYFENYL)AMIDU KYSELINY GALOVEJ F. ŠERŠEŇ, F. GREGÁŇ . . . . .	207

102	3Po-Ut30: 2,2-DINITROETHEN-1,1-DIAMIN (FOX-7), DYNAMIT 21. STOLETÍ? <i>K. DUDEK, Z. JALOVÝ, F. LIŠKA, P. MAREČEK, A. ŠILHÁNKOVÁ</i> . . . . .	208
103	3Po-Ut31: SYNTÉZA C-GLYKOSYLOVANÝCH DIPYRRINŮ A JEJICH KOMPLEXŮ S KOVY <i>O. ŠIMÁK, P. DRAŠAR</i> . . . . .	208
104	3Po-Ut32: SYNTÉZA A STRUKTURA NĚKTERÝCH AZOKOPULOVANÝCH CYKlick- ÝCH ENAMINONŮ <i>P. ŠIMŮNEK, L. LUSKOVÁ, M. SVOBODOVÁ, V. BERTOLASI, A. LYČKA, V. MACHÁČEK</i> . . . . .	209
105	3Po-Ut33: APLIKAČNÍ MOŽNOSTI MOLEKULÁRNÍHO MODELOVÁNÍ V HETERO- GENNÍ KATALÝZE <i>J. ŠPLÍCHALOVÁ, P. KAČER, M. KUZMA, L. ČERVENÝ</i> . . . . .	209
106	3Po-Ut34: STRUCTURE OF GLUCURONOXYLAN FROM SALVIA OFFICINALIS L. <i>P. CAPEK, M. MATULOVÁ, J. TURJAN, G. NOSÁLOVÁ</i> . . . . .	210
107	3Po-Ut35: SYNTHESIS OF C-3'-BRANCHED-CHAIN ADENOSINE USING MI- CROWAVE ACCELERATED AZA-CLAISEN REARRANGEMENT <i>M. TVRDOŇOVÁ, M. MARTINKOVÁ, J. GONDA</i> . . . . .	210
108	3Po-Ut36: EFFECT OF COUNTERION SIZE ON PROPAGATION RATE FOR THE AQUE- OUS PHASE POLYMERIZATION OF IONIZED METHACRYLIC ACID DETERMINED BY PLP-SEC TECHNIQUE <i>L. UČŇOVÁ, D. CHORVÁT, I. LACÍK</i> . . . . .	211
109	3Po-Ut37: OTEVŘENÉ FORMY ANTITUBERKULOTICKY AKTIVNÍCH BENZOXA- ZOLŮ A JEJICH SIRNÉ ANALOGY <i>Z. OKTÁBEC, J. VINŠOVÁ</i> . . . . .	211
110	3Po-Ut38: NEČEKANÝ VZNIK HYDROXY-N-(FENYLAMINO)-OXO- ALKYL)BENZAMIDŮ JAKO PRODUKTŮ ESTERIFIKACE AMINOKYSELIN <i>J. VINŠOVÁ, M. KRÁTKÝ, E. VAVŘÍKOVÁ, J. MONREAL FÉRRIZ, A. IMRAMOVSKÝ</i> . . . . .	212
111	3Po-Ut39: HYDROPHOBIC PROPERTIES OF SOME NOVEL ESTERS OF SALICY- LANILIDES <i>J. JAMPÍLEK, J. VINŠOVÁ, A. IMRAMOVSKÝ, J. MONREAL FÉRRIZ, J. DOHNAL</i> . . . . .	212
112	3Po-Ut40: GREEN SYNTHESIS OF RESVERATROL ANALOGUES AND THEIR INTER- ACTION WITH DNA <i>M. WALKO, V. VÍGLASKÝ</i> . . . . .	213
113	3Po-Ut41: STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIP OF OLOMOUCINE II DERIVA- TIVES AS CDK INHIBITORS <i>M. ZATLOUKAL</i> . . . . .	213
<b>20:00–01:00</b>	<b>Postery – sekcia 4</b>	
114	4Po-Ut1: VÝUKA SPEKTRÁLNÍCH METOD S VYUŽITÍM MULTIMEDIÁLNÍCH STUDI- JNÍCH PODKLADŮ NA UNIVERZITĚ PALACKÉHO V OLOMOUCI <i>D. MILDE</i> . . . . .	214
115	4Po-Ut2: JIHOMORAVSKÝ LIGNIT - OD HISTORIE K BUDOUCNOSTI <i>M. PEKAŘ, M. KLUČÁKOVÁ</i> . . . . .	214
116	4Po-Ut3: MED, POKRM (NEJEN) BOHŮ - ANEB POPULARIZACE PŘÍRODNÍCH VĚD NA DRUHÉM STUPNI ZÁKLADNÍCH ŠKOL <i>A. PANÁČKOVÁ, T. ŠTOSOVÁ, J. SOUKUPOVÁ, A. PANÁČEK, L. ZAJONCOVÁ, L. KVÍTEK</i> . . . . .	214
117	4Po-Ut4: VIRTUAL EDUCATION IN RUBBER TECHNOLOGY <i>J. ŠULCOVÁ, A. PLŠKO, I. STAŇOVÁ, P. JANYPKA, P. BEDNÁR</i> . . . . .	215
118	4Po-Ut5: IUPAC COMPENDIUM OF CHEMICAL TECHNOLOGY - <i>J. JIRÁT, M. NIČ, B. KOŠATA</i> . . . . .	215
119	4Po-Ut6: ELEKTRONICKÁ ENCYKLOPEDIIE BIOCHEMIE <i>J. ZNAMENÁČEK, J. JIRÁT, M. NIČ, E. DIBUSZOVÁ, B. KOŠATA, M. KODÍČEK, M. STROHALM</i> . . . . .	216
120	4Po-Ut7: EVROPSKÁ SPOLUPRÁCE VE VZDĚLÁVÁNÍ - PROGRAM SOCRATES/ERASMUS <i>J. SVATOŠOVÁ</i> . . . . .	216



**20:00–01:00 Postery – sekcia 5**

- 121 5Po-Ut1: DETECTION OF GENOTOXICITY OF CHEMICAL COMPOUNDS USING DIRECT CLEAVAGE OF SUGAR-PHOSPHATE BACKBONE IN SUPERCOILED PLASMID DNA  
*Z. PAVLÍČKOVÁ, J. ČERVENĚ, K. MALACHOVÁ, P. PEČINKA . . . . . 217*
- 122 5Po-Ut2: POLLUTANT LOAD FROM THE ANTHROPOGENIC ACTIVITIES IN BANSKÁ BYSTRICA REGION  
*D. SAMEŠOVÁ, I. NAGYOVÁ, Z. MELICHOVÁ . . . . . 217*
- 123 5Po-Ut3: APPLICATION OF AFFINITY CHROMATOGRAPHY FOR BACTERIAL PEPTIDASE PURIFICATION  
*E. SZABOVÁ, D. URMINSKÁ . . . . . 217*
- 124 5Po-Ut4: VYUŽITIE ZVÝŠKU PO IZOLÁCII L-ARABINÓZY Z REPNÝCH REZKOV PRI VÝROBE PAPIERA  
*M. FIŠEROVÁ, J. GIGAC, M. ROSENBERG, H. HRONSKA . . . . . 218*
- 125 5Po-Ut5: BUCKWHEAT (*FAGOPYRUM ESCULENTUM* MOENCH.) - A SOURCE OF BIOLOGICALLY ACTIVE COMPONENTS IN BREAD  
*T. BOJŇANSKÁ, D. URMINSKÁ . . . . . 218*
- 126 5Po-Ut6: PRÍPRAVA ESTEROV FRUKTÓZY A MASTNÝCH KYSELÍN ENZÝMOVOU CESTOU  
*L. POLÁKOVÁ, T. KARLOVÁ, J. ŠMIDRKAL . . . . . 219*
- 127 5Po-Ut7: INFLUENCE OF GARLIC JUICE ON QUALITY OF WHEAT-SPELT BAKED GOODS  
*Z. KOHAJDOVÁ, J. KAROVIČOVÁ, J. LEHKOŽIVOVÁ, Ž. GAJDOŠOVÁ, Š. SCHMIDT . . . . . 219*
- 128 5Po-Ut8: INFLUENCE OF POTASSIUM IODATE ON QUALITY OF WHEAT-SPELT BAKED GOODS  
*Z. KOHAJDOVÁ, J. KAROVIČOVÁ, J. LEHKOŽIVOVÁ, Ž. GAJDOŠOVÁ . . . . . 220*
- 129 5Po-Ut9: BIOMODIFIKOVANÉ ZEOSORBENTY NA BÁZE PRÍRODNÉHO KLINOPTILOLITU  
*L. FORTUNOVÁ, M. REHÁKOVÁ, S. ČUVANOVÁ, L. GABEROVÁ, M. KUŠNIEROVÁ . . . . . 221*
- 130 5Po-Ut10: ISOFLAVONOIDS IN THE CANNABACEAE FAMILY  
*R. KOBLOVSKÁ . . . . . 221*
- 131 5Po-Ut11: STUDIUM FOTOKATALYTICKEJ REDUKCE RTUŤNATÝCH IONTŮ S VYUŽITÍM HETEROGENNÍ KATALÝZY  
*P. MOŽÍŠKOVÁ, M. VESELÝ . . . . . 221*
- 132 5Po-Ut12: FUROZÍN V KEČUPOCH  
*J. LEHKOŽIVOVÁ, J. KAROVIČOVÁ, M. VOLDŘICH . . . . . 222*
- 133 5Po-Ut13: PRÍPRAVA VZORKŮ PRO ROHS ANALÝZU  
*J. PALARČÍK, M. POUZAR . . . . . 223*
- 134 5Po-Ut14: VLIV B-HCH NA ROSTLINY KUKUŘICE A OBSAH THIOLOVÝCH SLOUČENIN  
*O. KRYŠTOFOVÁ, J. KLÁNOVÁ, K. STEJSKAL, F. HLÁVKA, V. ADAM, L. TRNKOVÁ, J. ZEHNÁLEK, R. KIZEK . . . . . 223*
- 135 5Po-Ut15: ARZÉN A PODZEMNÉ VODY AKO ZDROJ PITNEJ VODY  
*V. PAVLÍK, A. HEGEDUSOVA, O. HEGEDUS . . . . . 224*
- 136 5Po-Ut16: INFLUENCE OF SELENIUM COMPOUNDS ON GERMINATION AND GROWING PROCESS IN *PISUM SATIVUM* L.  
*A. VARGOVÁ, S. ŠIMKOVÁ, O. HEGEDUS, A. HEGEDUSOVA, K. JOMOVÁ . . . . . 224*
- 137 5Po-Ut17: CALORIMETRIC AND ELECTROCHEMICAL BIOSENSOR SYSTEMS FOR ONLINE ANALYSIS OF GLYCEROL DURING ITS MICROBIAL CONVERSION TO 1,3-PROPANEDIOL  
*J. ŠEFČOVIČOVÁ, P. GEMEINER, V. ŠTEFUCA, J. KATRLÍK, I. VOŠTIAR, V. MASTIHUBA, J. TKÁČ . . . . . 225*
- 138 5Po-Ut18: DEGRADACE METHYL TERT-BUTYL ETHERU (MTBE) V BIOREAKTORU.  
*R. LEHNERT, P. GAVLASOVÁ, G. KUNCOVÁ, J. BOLYÓ . . . . . 225*
- 139 5Po-Ut19: VALIDÁCIA ANALYTICKEJ METÓDY ET-AAS PRE STANOVENIE SELÉNU A KADMIA  
*S. ŠIMKOVÁ, J. ŠVIKRUHOVÁ, O. HEGEDUS . . . . . 226*

140	5P <sub>o</sub> -Ut20: VÝBER MIKROORGANIZMOV SCHOPNÝCH BIOTRANSFORMÁCIE BRO-MOVANÝCH LÁTOK A TESTOVANIE LAKÁZOVEJ AKTIVITY <i>B. UHNÁKOVÁ, V. VEJVODA, M. RÁZGA, O. ŠVEDA, L. MARTÍNKOVÁ, V. KŘEN</i> . . . . .	226
141	5P <sub>o</sub> -Ut21: GENOTOXICITY OF PYROMETALLURGICAL WASTE MATERIALS <i>J. LEŠKOVÁ, K. MALACHOVÁ, Z. PAVLÍČKOVÁ</i> . . . . .	227
142	5P <sub>o</sub> -Ut22: SORPTION-DESORPTION CHARACTERIZATION OF CELL WALL B-D-GLUCAN FROM SACCHAROMYCES CEREVISIAE TOWARD PCP <i>M. PAJTINKA, Z. SEJÁKOVÁ, P. ZAJKOSKA</i> . . . . .	227
143	5P <sub>o</sub> -Ut23: BIODEGRADACE HERBICIDŮ LIGNINOLYTICKÝMI HOUBAMI <i>P. ZACHAŘ, Č. NOVOTNÝ</i> . . . . .	228
144	5P <sub>o</sub> -Ut24: VÝSKUM BIOAKTÍVNYCH LÁTOK PRODUKOVANÝCH ENDOFYTICKÝM MIKROORGANIZMOM FUSARIUM SPOROTRICHOIDES. <i>M. MALIAROVÁ, M. VALACHOVÁ, M. FELČÍR, T. MALIAR</i> . . . . .	228
145	5P <sub>o</sub> -Ut25: PRÍRODNÁ REZERVÁCIA ŽITAVSKÝ LUH - SLEDOVANIE DYNAMIKY ZMIEN VYBRANÝCH FRAKCIÍ SÍRY V PŮDACH <i>M. FESZTEROVÁ, L. JEDLOVSKÁ, A. ZAUJEC</i> . . . . .	229
146	5P <sub>o</sub> -Ut26: ENVIRONMENTÁLNÍ ASPEKT POUŽITÍ JEČMENNÉHO HYDROLYZÁTU NOVÉ GENERACE PRO VÝROBU PIVA <i>T. ZOUFALÝ, P. BRYNYCH</i> . . . . .	229

**21:00–22:00 NANOWorkshop**

**5. 9. 2007 (Streda)**

**08:30–09:20 Plenárne prednášky**

08:30	MOŽNOSTI CHARAKTERIZÁCIE A KLASIFIKÁCIE ÚDAJOV CHEMOMETRICKÝMI TECHNIKAMI <i>J. MOCÁK</i> . . . . .	230
-------	--	-----

**08:30–09:20**

08:30	BIONANOTECHNOLOGY PROJECT AT ANF DATA <i>M. POLČÍK</i> . . . . .	232
-------	---	-----

**09:30–09:20 Pozvané prednášky: Mocák J., Štíbr B.**

**09:20–09:25 Presun z pozvaných prednášok do miestností**

**09:25–12:25 Prednášky – sekcia 1**

09:25	GAS-PHASE AND SOLUTION CONFORMATIONS OF BASIC STRUCTURAL UNITS OF HEPARIN <i>M. REMKO, C. VON DER LIETH</i> . . . . .	232
09:50	A STOCHASTIC MODEL OF CALCIUM-INDUCED CALCIUM RELEASE IN CARDIAC MYOCYTE <i>P. PETROVIČ, A. ZAHRADNÍKOVÁ, I. ZAHRADNÍK, I. VALENT</i> . . . . .	233

**10:15 Prestávka – občerstvenie**

10:45	CAPILLARY ELECTROPHORESIS - QUESTIONS IN BIOANALYSIS <i>J. PETR, V. MAIER, J. ZNALEZIONA, O. RYPAROVÁ, M. KOWALSKA, R. KNOB, K. VÍTKOVÁ, V. RANC, J. ŠEVČÍK</i> . . . . .	233
11:10	HIGH RESOLUTION NMR SPECTROSCOPY OF WINE SAMPLES <i>M. MAZÚR, P. BOŤANSKÁ, K. FURDÍKOVÁ, M. VALKO, M. KALIŇÁK</i> . . . . .	234
11:35	ANTHOKYANOVÝ KOMPLEX BAREVNÝCH ODRUD BRAMBOR <i>M. ŠULC</i> . . . . .	234
12:00	DIELECTRIC PROPERTIES OF SELECTED LAYERED SILICATES DETERMINED BY TERAHERTZ TIME-DOMAIN SPECTROSCOPY <i>M. JANEK, I. BUGÁR, D. LORENC, V. SZÖCS, D. VELIČ, D. CHORVÁT</i> . . . . .	234

**12:00–14:30 Obed**

<b>14:30–15:20</b>	<b>Pozvané prednášky: Šajgalík J., Babor K.</b>	
<b>15:20–15:25</b>	<b>Presun z pozvaných prednášok do miestností</b>	
<b>15:25–18:00</b>	<b>Prednášky – sekcia 1</b>	
15:25	CALCIUM SPARK FREQUENCY AND WAVE PROPAGATION IN A FIRE-DIFFUSE-FIRE MODEL OF CARDIAC MYOCYTE <i>I. VALENT, I. ZAHRADNÍK, A. ZAHRADNÍKOVÁ . . . . .</i>	235
15:50	HETERO-VIBRATIONAL INTERACTIONS, COOPERATIVE HYDROGEN BONDING AND VIBRATIONAL ENERGY RELAXATION <i>P. BODIŠ, W.J. BUMA, S. WOUTERSEN . . . . .</i>	235
<b>16:15</b>	<b>Prestávka – občerstvenie</b>	
16:45	POLYMERIC TRANSDUCERS RECENTLY USED IN BIOSENSING. ELECTROCHEMISTRY OF POLYMERIC FILMS <i>J. GALANDOVÁ, R. OVADEKOVA, G. ZIYATDINOVA, J. LABUDA . . . . .</i>	236
17:10	MOŽNOSTI ATOMOVÉ SPEKTROSKOPIE PŘI STANOVENÍ Hg <i>J. SEIDLEROVÁ, M. NOVÁČKOVÁ . . . . .</i>	236
17:35	ELEKTROCHEMICKÁ SYNTÉZA 4-METHOXYBENZADLEHYDU. VLIV ZÁKLADNÍHO ELEKTROLYTU NA KINETIKU A SELEKTIVITU REAKCE <i>T. BYSTROŇ, K. BOUZEK . . . . .</i>	236
<b>09:25–12:00</b>	<b>Prednášky – sekcia 2</b>	
09:25	VYUŽITELNOSTĚ PORTLANDSKÝCH CEMENTOV PRE SYNTÉZY MDF MATERIÁLŮV <i>M. DRÁBIK . . . . .</i>	237
09:50	MOŽNOSTI ZEFEKTÍVNENIA VÝROBNÉHO PROCESU OLOVNATÉHO KRIŠTÁLU <i>D. ONDRUŠOVÁ, G. RUDINSKÁ, M. PAJTÁŠOVÁ . . . . .</i>	238
<b>10:15</b>	<b>Prestávka – občerstvenie</b>	
10:45	HYBRIDNÉ ANORGANICKO-ORGANICKÉ ZLÚČENINY KOBALTU A NIKLU NA BÁZE POLYVANADIČNANOV <i>L. ŽÚRKOVÁ, E. RAKOVSKÝ . . . . .</i>	238
11:10	BIOLOGICKY AKTÍVNE KOORDINAČNÉ ZLÚČENINY ZINKU <i>K. GYORYOVA, D. HUDECŮVÁ, J. KOVÁŘOVÁ . . . . .</i>	238
11:35	KOMPLEXNÉ ZLÚČENINY ŽELEZA S DERIVÁTMI PYRIDÍNU <i>I. ONDREJKOVIČOVÁ, S. GALKOVÁ . . . . .</i>	239
12:00	VLIV STRUKTURNÍCH CHARAKTERISTIK ANODY NA ELEKTROCHEMICKOU SYNTÉZU ŽELEZANŮ <i>K. BOUZEK, Z. MÁCOVÁ . . . . .</i>	240
<b>15:25–18:25</b>	<b>Prednášky – sekcia 2</b>	
15:25	KRYSTALOCHEMICKÉ PROJEKTOVÁNÍ FÁZÍ S POŽADOVANÝMI VLASTNOSTMI <i>D. HAVLÍČEK, O. KAMAN . . . . .</i>	240
15:50	PŘÍPRAVA A VYUŽITÍ NANOČÁSTIC STRĚBRA <i>L. KVÍTEK, A. PANÁČEK, R. PRUCEK, J. SOUKUPOVÁ, R. ZBOŘIL . . . . .</i>	240
<b>16:15</b>	<b>Prestávka – občerstvenie</b>	
16:45	FOTOFYZIKÁLNÍ A BAKTERICIDNÍ VLASTNOSTI NANOTKANIN DOPOVANÝCH FOTODYNAMICKÝMI SENSITIZERY <i>J. MOSINGER, K. LANG, P. KUBÁT . . . . .</i>	241
17:10	SOLI DUSÍKATÝCH BAZÍ S DELOKALIZOVANÝMI ELEKTRONY - NOVÉ MATERIÁLY PRO NELINEÁRNÍ OPTIKU <i>I. NĚMEC, I. MATULKOVÁ, I. CÍSAŘOVÁ, R. GYEPES, M. FRIDRICHOVÁ, L. KODRLOVÁ, P. NĚMEC . . . . .</i>	241
17:35	DEPOZICE TENKÝCH VRSTEV INKJETOVOU TECHNIKOU <i>P. DZIK, M. VESELÝ, J. CHOMOUCÁ, L. RÁBOVÁ . . . . .</i>	242

<b>09:25–10:45</b>	<b>Prednášky – sekcia 3</b>	
09:25	POLYMERS ON THE 2-OXAZOLINE BASIS CONTAINING BIPHENYL STRUCTURE <i>J. LUSTOŇ, J. KRONEK, I. JANIGOVÁ</i> . . . . .	242
09:50	PHOTOCHEMISTRY OF CONJUGATED PHEHOLS CONTAINING 2-OXAZOLINE RING <i>J. KRONEK, J. LUSTOŇ</i> . . . . .	243
<b>10:15</b>	<b>Prestávka – občerstvenie</b>	
10:45	NOVÉ TERMORESPOUSIVNÍ POLYMERY PRO KOMBINOVANOU LOKÁLNÍ CHEMORADIOTERAPII <i>M. HRUBÝ, J. KUČKA, J. KOZEMPEL, O. LEBEDA, Č. KOŇÁK, K. ULBRICH</i> . . . . .	243
11:10	VEKTORY PRO GENOVOU TERAPII SMĚROVANÉ POMOCÍ SYNTETICKÝCH OLIGOPEPTIDŮ <i>M. PECHAR, R. POLA, K. ULBRICH, R. CARLISLE, L. SEYMOUR</i> . . . . .	244
11:35	PESTROST PEVNÝCH FARMACEUTICKÝCH SUBSTANCÍ (POLYMORFY, HYDRÁTY, SOLVÁTY, AMORFÁTY, SOLI, KOKRYSTALY) <i>B. KRATOCHVÍL</i> . . . . .	245
<b>14:30–15:20</b>	<b>Plenárne prednášky</b>	
14:30	POLYMER DERIVED SILICON CARBIDE CERAMICS <i>P. ŠAJGALÍK, Z. LENČEŠ</i> . . . . .	245
<b>14:30–15:20</b>		
14:30	60 ROKOV CHEMICKÝCH ZVESTÍ - CHEMICAL PAPERS <i>K. BABOR</i> . . . . .	245
<b>15:25–16:45</b>	<b>Prednášky – sekcia 3</b>	
15:25	HYDROGENACE VYBRANÝCH OLEFÍNŮ ZASTOUPENÝCH V PYROLYZNÍM BEN- ZÍNU <i>Z. SAZANOV, V. TUKAČ, V. CHYBA, M. HANDLOVÁ, J. HANIKA, J. LEDERER, J. KOLENA</i> . . . . .	246
15:50	SYNTÉZY VÍCEJADERNÝCH NH KYSELIN A ŘEŠENÍ JEJICH STRUKTURY <i>I. FRYŠOVÁ, J. SLOUKA, A. LYČKA</i> . . . . .	246
<b>16:15</b>	<b>Prestávka – občerstvenie</b>	
16:45	FACTORS INFLUENCING THE C-ON BOND STRENGTH OF THE ALKOXYAMINES IN THE STYRENE-ACRYLONITRILE-TEMPO COPOLYMERIZATION SYSTEM <i>E. MEGIEL, A. KAIM</i> . . . . .	247
17:10	DIFFERENT BEHAVIOUR OF (ACRIDIN-9-YL)THIOSEMICARBAZIDES IN SYNTHESIS OF THE THIAZOLIDINONE HETEROCYCLES. <i>J. TOMAŠČIKOVÁ, I. DANIHEL, J. IMRICH, P. KRISTIAN, S. BÖHM</i> . . . . .	247
17:35	PRODUKTY SULFONACE DIANHYDRIDU 3, 4, 9, 10- PERYLENTETRAKARBOXYLOVÉ KYSELINY OLEEM A MOŽNOSTI JEJICH PRŮMYSLOVÉHO VYUŽITÍ <i>L. DUŠEK, M. ČERNÝ, L. BURGERT</i> . . . . .	248
<b>09:25–12:00</b>	<b>Prednášky – sekcia 4</b>	
09:25	VĚDA PRO STŘEDOŠKOLÁKY - PROJEKT BADATEL <i>M. KUBALA</i> . . . . .	248
09:50	ZAVÁDĚNÍ E-LEARNINGOVÝ AKTIVIT DO VÝUKY NA FCHT UNIVERZITY PARDUBICE <i>M. VLČEK, V. VLČKOVÁ</i> . . . . .	249
<b>10:15</b>	<b>Prestávka – občerstvenie</b>	
10:45	CHEMICKÁ SOUTĚŽ PRO ŽÁKY A STUDENTY - LABYRINT 2006 <i>M. PAVLÍČEK, M. KLEČKOVÁ, M. VAŠÍČKOVÁ, T. ŠTOSOVÁ, P. CANKAŘ, L. KVÍTEK</i> . . . . .	249
11:10	POPULARIZACE STUDIA PŘÍRODNÍCH VĚD FORMOU SOUTĚŽÍ ŠKOLNÍCH KOLEKTIVŮ <i>L. ZAJONCOVÁ, P. TARKOWSKI, L. KVÍTEK, J. SOUKUPOVÁ, T. ŠTOSOVÁ, V. FADRNÁ, R. MENZELOVÁ</i> . . . . .	249

11:35	VEDECKÁ ČINNOSŤ PROFESOROV Š. SCHENKA A R. SCHELLEHO NA BANSKOŠTIAVNICKEJ AKADÉMII <i>I. HERČKO</i> . . . . .	250
<b>15:25–18:00</b>	<b>Prednášky – sekcia 4</b>	
15:25	ODPADY - ZDROJ ZNEČISTENIA PROSTREDIA. ORIENTÁCIA CVIČENÍ Z APLIKOVANEJ CHÉMIE NA MONITOROVANIE ŽIVOTNÉHO PROSTREDIA. <i>M. FESZTEROVÁ</i> . . . . .	250
15:50	UČEBNÁ POMÔCKA NA SLEDOVANIE VLASTNOSTÍ BIOLOGICKÉHO MATERIÁLU - PRENOSNÝ ŠKROBOMER <i>M. FESZTEROVÁ, O. BARÁTH</i> . . . . .	251
<b>09:25–12:00</b>	<b>Prednášky – sekcia 5</b>	
09:25	ZDROJE HUMINOVÝCH LÁTEK V ČESKÉ REPUBLICE <i>L. MADRONOVÁ, J. NOVÁK, J. KOZLER, P. ROJÍK</i> . . . . .	251
09:50	HUMÁTY KOVŮ <i>S. KRŽIŽENECKÁ, S. HEJDA, T. BRUNA, M. NOVÁK, V. MALIMÁNKOVÁ</i> . . . . .	252
<b>10:15</b>	<b>Prestávka – občerstvenie</b>	
10:45	REDOXNÍ PROCESY SÍRY, ŽELEZA A MANGANU V UMĚLÉM MOKŘADU <i>J. ŠÍMA, K. DIÁKOVÁ, V. HOLCOVÁ</i> . . . . .	252
11:10	ELUÁCIA RIZIKOVÝCH PRVKOV RÔZNYMI EXTRAČNÝMI ČINIDLAMI <i>J. TOMÁŠ, P. LAZOR, J. BYSTRICKÁ, P. TREBICHALSKÝ, L. LAHUČKÝ, D. BAJČAN</i> . . . . .	253
11:35	ÚČINOK Se(IV) A Se(VI) V KOMBINÁЦИИ S Cu, Zn A Cd NA SLADKOVODNÚ RIASU DESMODESMUS QUADRICAUDA <i>J. PASTIEROVÁ, A. FARGAŠOVÁ</i> . . . . .	254
<b>15:25–18:00</b>	<b>Prednášky – sekcia 5</b>	
15:25	LET'S PLAY THE GREEN GAME! THE BRAIN'S OWN MARIJUANA. <i>A.E. LIS</i> . . . . .	254
15:50	OBSAH KYSELINY CHLOROGENOVÉ A KÁVOVÉ V BAREVNÝCH ODRŮDÁCH BRAMBOR <i>M. ORSÁK</i> . . . . .	255
<b>16:15</b>	<b>Prestávka – občerstvenie</b>	
16:45	FARBA - KVALITATÍVNÝ PARAMETER RAJČIAKOVÝCH VÝROBKOV <i>J. LEHKOŽIVOVÁ, J. KAROVIČOVÁ, Z. KOHAJDOVÁ, M. VOLDŘICH</i> . . . . .	255
17:10	ČISTENIE EXTRAKTOV STÉVIE CUKROVEJ <i>A. DANDÁR, L. MINAROVICHOVÁ</i> . . . . .	255
17:35	ANTIMIKROBIÁLNY ÚČINOK PRODUKTOV METABOLIZMU KYSLOMLIEČNÝCH BAKTÉRIÍ. <i>E. KRAJČOVÁ, M. GREIFOVÁ, Z. GAJDOSOVA, G. GREIF, Š. SCHMIDT</i> . . . . .	256
<b>09:25–12:00</b>	<b>Prednášky – sekcia 6</b>	
09:25	ASPEKTY ROZVOJA VLÁKNITÝCH MATERIÁLOV VO SVETE A U NÁS <i>M. JAMBRICH, D. BUDZÁK, J. KOCHAN</i> . . . . .	256
09:50	MICROWAVE - ASSISTED HYDROPHOBIZATION OF HYDROXYETHYLCELLULOSE <i>S. MINÍKOVÁ, I. SROKOVÁ, V. SASINKOVÁ, A. EBRINGEROVÁ</i> . . . . .	257
<b>10:15</b>	<b>Prestávka – občerstvenie</b>	
10:45	MODELLING OF FERROUS CHLORIDE PRODUCTION FOR NEEDS OF ITS IMPROVEMENT AND OPTIMIZATION <i>V. HANTA, J. POŽIVIL</i> . . . . .	257
11:10	ŠTRUKTÚRA A VLASTNOSTI VLÁKNITÝCH MATERIÁLOV NA BÁZE POLYPROPYLENOVÝCH A BAMBUSOVÝCH VLÁKIEN <i>J. BALOGOVÁ, J. VNENČÁKOVÁ, M. JAMBRICH, L. HAJDÚCHOVÁ, E. PAVLÍKOVÁ</i> . . . . .	258
11:35	ALTERNATIVNÍ SUROVINY PRO CHEMICKÝ PRŮMYSL A VÝROBU PALIV <i>J. LEDERER</i> . . . . .	258

<b>15:25–18:00</b>	<b>Prednášky – sekcia 6</b>	
15:25	ADHÉZNE A POVRCHOVÉ VLASTNOSTI POLYETYLÉNTEREFTALÁTU MODIFIKOVANÉHO PLAZMOU <i>I. NOVÁK, M. ŠTEVIAR, I. CHODÁK, I. JANIGOVÁ, M. ŠPÍRKOVÁ, M.M. CHEHIMI, O. ŠOLCOVÁ, P. STOPKA</i> . . . . .	258
15:50	INOVÁCIA BAKALÁRSKEHO ŠTÚDIA CHÉMIE NA PRIF UK V BRATISLAVE S PRIHLIADNUTÍM NA POŽIADAVKY TRHU PRÁCE <i>M. SALIŠOVÁ, L. ŽÚRKOVÁ, E. RAKOVSKÝ, V. POLÁČKOVÁ, R. ŠEBESTA</i> . . . . .	259
<b>16:15</b>	<b>Prestávka – občerstvenie</b>	
16:45	THE STRUCTURE AND PROPERTIES OF FIBROUS MATERIALS BASED ON SPECIAL TYPE OF SYNTHETIC AND MICROBIAL FIBRES <i>E. BENČÍKOVÁ, K. ŠČASNÍKOVÁ, M. JAMBRICH, L. HAJDÚCHOVÁ, M. ŠIARNIK</i> . . . . .	259
17:10	ÚČINNOST INHIBITORŮ KOROZE ZA PŘÍTOMNOSTI ÚSAD A KOROZNÍCH PRODUKTŮ <i>J. PETRŮ, P. SAJDL, O. PROKEŠ, M. HUBIČKOVÁ</i> . . . . .	260
<b>18:00–19:00</b>	<b>Odvoz autobusmi z hotela Hutník na Medvediu lúku</b>	
<b>19:00–00:00</b>	<b>Opekačka na Medvedej lúke</b>	

## 6. 9. 2007 (Štvrtok)

<b>08:30–11:05</b>	<b>Prednášky – sekcia 1</b>	
08:30	ALKALICKÁ HYDROLÝZA KUMARÍNOV A CHROMÓNOV A KINETICKÉ STANOVENIE ICH ASOCIAČNÝCH KONŠTÁNT S CYKLODEXTRÍNMI <i>J. BENKO, O. VOLLÁROVÁ, M. MATEJDES</i> . . . . .	260
08:55	MALONDIALDEHYD JAKO MARKER PRO STANOVENÍ POŠKOZENÍ JEDLÝCH OLEJŮ LIPOPEROXIGENACÍ <i>V. PIVEC, M. ŠULC</i> . . . . .	261
09:20	INTERAKCIE GLYKOLOV S HYDROFILNÝMI A HYDROFÓBNÝMI IÓNNI V ZMESIACH VODA - GLYKOLY <i>O. VOLLÁROVÁ, J. BENKO, M. JAVOROVÁ</i> . . . . .	261
<b>09:45</b>	<b>Prestávka – občerstvenie</b>	
10:15	SPECTROFLUORIMETRIC ANALYSIS OF THE BINDING OF MITOCHONDRIAL TELOMERE-BINDING PROTEIN TO TELOMERIC OLIGONUCLEOTIDE <i>E. SMREKOVA, M. ŠEBESTA, J. NOSEK, L. TOMÁŠKA, I. VALENT</i> . . . . .	262
10:40	JEDNOKROKOVÁ APROXIMÁCIA V CHEMICKEJ KINETIKE <i>P. ŠIMON</i> . . . . .	262
<b>08:30–11:05</b>	<b>Prednášky – sekcia 2</b>	
08:30	FOTOKATALYTICKÁ DEGRADACE ORANŽE II NA ČÁSTICOVÝCH VRSTVÁCH PŘIPRAVENÝCH Z RŮZNÝCH PRÁŠKOVÝCH FOTOKATALYZÁTORŮ <i>M. ZLÁMAL, J. KRÝSA, J. JIRKOVSKÝ</i> . . . . .	262
08:55	ČISTOTA A CHEMIE PAROVODNÍCH ENERGETICKÝCH OKRUHŮ <i>I. JIŘÍČEK, L. DIBLÍKOVÁ, M. KOLOVRATNÍK</i> . . . . .	263
09:20	RADIAČNÍ ODSTRAŇOVÁNÍ Co(II) A Ni(II) Z VODNÝCH ROZTOKŮ <i>P. KOVAŘÍK, M. POSPÍŠIL, V. ČUBA, B. DRTINOVÁ</i> . . . . .	263
<b>09:45</b>	<b>Prestávka – občerstvenie</b>	
10:15	MODIFIKOVANÉ ALUMINOSILIKÁTY JAKO SELEKTIVNÍ SORBENTY OXOANIONTŮ Z VODNÝCH SYSTÉMŮ <i>B. DOUŠOVÁ, L. FUITOVA, L. HERZOGOVÁ, D. KOLOUŠEK, T. GRYGAR, V. MACHOVIČ</i> . . . . .	264
10:40	THE COORDINATION COMPOUNDS OF SODIUM AND CRYSTAL STRUCTURE OF POLYMERIC {NA(M-OH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (MALEINATE-O)(H <sub>2</sub> O)} <sub>N</sub> <i>M. KOMAN, J. MAROSZOVÁ, M. PAJTÁŠOVÁ, M. MELNÍK</i> . . . . .	264

**08:55–11:05 Prednášky – sekcia 3**

- 08:55 AMFIFILNÍ FLAVINIOVÉ SOLI JAKO KATALYZÁTORY OXIDACE SULFIDŮ  
V MICELÁRNÍM PROSTŘEDÍ  
*R. CIBULKA, L. BAXOVÁ, S. SAYIN, F. HAMPL* . . . . . 265
- 09:20 CHEMISTRY OF 8-HOMOBRENDANE, 2-HOMOBRENDANE AND PROTOADAMANTANE  
*M. KRÍŽ* . . . . . 266

**09:45 Prestávka – občerstvenie**

- 10:15 METODY VÝROBY CYKLOHEXANKARBONITRILU VE SHODĚ S PRINCIPY ŠETRNÉ  
ZELENÉ CHEMIE  
*P. PAZDERA, J. ŠIMBERA, J. BĚLUŠA* . . . . . 266
- 10:40 SYNTÉZA NĚKTERÝCH NOVÝCH BENZO[C]FENANTHRIDINOVÝCH ALKALOIDŮ  
*J. STÝSKALA, P. CANKAŘ, J. HLAVÁČ* . . . . . 267

**08:30–11:05 Prednášky – sekcia 5**

- 08:30 OBTAINING OF ACTIVATED CARBONS FROM RICE HULL ASH  
*O. ZUFAROV, Š. SCHMIDT, S. SEKRETÁR, Q. SERKAEV, L. ZAHRADNÍKOVÁ, L. JANÁČ* . . . . . 267
- 08:55 STABILIZÁCIA JEDLÝCH OLEJOV ANTIOXIDAČNÝMI FORMULÁCIAMI NA BÁZE  
ŠROTOV PUPALKY DVOJROČNEJ  
*L. ZAHRADNÍKOVÁ, Š. SCHMIDT, S. SEKRETÁR, L. JANÁČ* . . . . . 267
- 09:20 VPLYV POTRAVINÁRSKYCH PROCESOV NA OBSAH PRÍRODNÝCH ANTIOXIDANTOV  
*Š. SCHMIDT, S. SEKRETÁR, L. ZAHRADNÍKOVÁ, L. JANÁČ, O. ZUFAROV* . . . . . 268

**11:05–12:00 Panelová diskusia ako záver 59. zjazdu chemikov****12:00–14:00 Obed**

