

63. ZJAZD CHEMIKOV

5. – 9. september 2011

Vysoké Tatry, Tatranské Matliare, hotelový komplex Hutník

HLAVNÝ ORGANIZÁTOR

Slovenská chemická spoločnosť



v spolupráci

Asociácia slovenských chemických
a farmaceutických spoločností



Asociace českých chemických společností



IYC 2011

International Year of
CHEMISTRY

ORGANIZAČNÝ VÝBOR

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

PROGRAMOVÝ VÝBOR

Prof. Ing. Dr. Jozef Tomko, DrSc. (SChS)
Doc. RNDr. Milan Drábik, PhD. (SChS)
Ing. Miloš Revús (SSPCH, BA)
RNDr. Dalma Gyepesová, CSc. (SChS)
Doc. RNDr. Marta Sališová, CSc. (SChS)
Prof. Ing. Vlasta Brezová, DrSc. (SChS)
Ing. Mária Omastová, DrSc. (SChS)
Ing. Marián Janek, PhD. (SChS)
RNDr. Jozef Tatiersky, PhD. (SChS)
Mgr. Katarína Javorová (SChS)
Dr.h.c. prof. Ing. Karol Florián, DrSc. (SCHS)
Prof. Ing. Ján Labuda, DrSc. (STU, BA)
Prof. Ing. Marián Koman, DrSc. (STU, BA)
Doc. Ing. Ján Moncol, PhD. (STU, BA)
Prof. Ing. Martin Bajús, DrSc. (STU, BA)
Ing. Michal Korenko, PhD. (SAV, BA)
Prof. Ing. Stanislav Biskupič, DrSc. (STU, BA)
Doc. RNDr. Andrej Boháč, CSc. (UK, BA)
Doc. Ing. Milan Vrška, CSc. (STU, BA)
Prof. RNDr. Milan Hutta, DrSc. (UK, BA)
Doc. RNDr. Jozef Kuruc, PhD. (UK, BA)
Prof. Ing. Milan Remko, DrSc. (UK, BA)
Prof. Ing. Ľubor Fišera, DrSc. (STU, BA)
Doc. Ing. Dušan Berek, DrSc. (SAV, BA)
Prof. Ing. Štefan Schmidt, PhD. (STU, BA)
Ing. Ján Hirsch, DrSc. (SAV, BA)
Prof. Ing. Peter Šimon, DrSc. (STU, BA)
Prof. Ing. Vasil Koprda, DrSc. (STU, BA)
Doc. Ing. Ján Reguli, PhD. (TU, TT)
Doc. RNDr. Martin Putala, PhD. (UK, BA)
Doc. RNDr. Taťána Gondová, CSc. (UPJŠ, KE)
Doc. RNDr. Mária Reháková, CSc. (UPJŠ, KE)
Doc. RNDr. Renáta Oriňáková, CSc. (TU, KE)
Prof. RNDr. Nadežda Številová, PhD. (TU, KE)
RNDr. Slávka Hamuláková, PhD. (UPJŠ, KE)
Doc. RNDr. Mária Ganajová, CSc. (UPJŠ, KE)
Doc. RNDr. Magdaléna Bálintová, PhD. (TU, KE)
Ing. Elena Kulichová (Nováky)
RNDr. Beáta Vranovičová, PhD. (UCM, TT)

PROGRAM 63. ZJAZDU CHEMIKOV**Pondelok 5. 9. 2011**

- 09:00 – 18:30 Registrácia účastníkov, recepcia Hutníka II
 14:00 – 18:30 Organizovaný odvoz autobusmi zo železničnej stanice Poprad
 19:00 – 24:00 Uvítací večierok

Utorok 6. 9. 2011

- 08:30 – 09:00 Odvoz autobusmi z hotelového komplexu Hutník do Tatranskej Lomnice, kino Tatry
 09:00 – 09:15 Otvorenie zjazdu, kino Tatry
09:15 – 10:00 Plenárna prednáška Prof. Nicole Moreau
 10:00 – 11:30 Príhovory zástupcov sponzorov, predstaviteľov chemických spoločností a asociácií a funkcionárov SAV a fakúlt s chemickým profilom
 11:30 – 12:00 Odvoz autobusmi z Tatranskej Lomnice do hotelového komplexu Hutník
 12:30 – 14:20 Obed v hotelovom komplexe Hutník
 14:20 – 18:00 Prednášky v sekciách, príprava posterov
 18:00 – 20:00 Večera v hotelovom komplexe Hutník
 20:00 – 24:00 Posterové prezentácie, hotelový komplex Hutník - telocvičňa, vínný večer
 20:30 – 21:30 **IYC 2011 Colloquium**
- D. Velic. Slovakia on Map of Chemistry
 - M. Drabik, ASCHFS - Results and Prospectives
 - V. Milata, SCHS - Results and Prospectives
 - N. Moreau, IUPAC - Future of IYC
 - Discussion

Streda 7. 9. 2011

- 08:30 – 12:25 Prednášky v sekciách, príprava posterov
 12:30 – 14:20 Obed v hotelovom komplexe Hutník
 14:00 – 18:00 Výlety
 18:00 – 20:00 Večera v hotelovom komplexe Hutník
 20:00 – 24:00 Posterové prezentácie, hotelový komplex Hutník - telocvičňa, pívny večer
 20:30 – 21:30 Valné zhromaždenie SCHS

Štvrtok 8. 9. 2011

- 08:30 – 12:25 Prednášky v sekciách
 12:30 – 14:20 Obed v hotelovom komplexe Hutník
 14:30 – 18:15 Prednášky v sekciách
 19:00 – 24:00 Záverečný večierok, hotel Hutník, vyhodnotenie najlepších posterov, vyhlásenie víťaza Ceny Shimadzu 2011

Piatok 9. 9. 2009

- 08:30 – 11:05 Prednášky v sekciách
 11:10 – 12:00 Panelová diskusia ako záver zjazdu
 12:00 – 14:00 Obed v hotelovom komplexe Hutník, 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. Ján Labuda DrSc.

Ústav analytickej chémie, FCHPT STU, Bratislava

2. Anorganická a materiálová chémia

(Koordinačná chémia, Bioanorganická chémia, Anorganická supramolekulová chémia, Organokovová chémia (z hľadiska štruktúry a koordinácie a vlastnosti kovového prvku), Kryštálové inžinierstvo)

Doc. Ing. Ján Moncol, PhD.

Ústav anorganickej chémie, SAV, 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, DrSc.

Ústav polymérov, SAV, Bratislava

4. Vyučovanie a história chémie

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

Doc. RNDr. Marta Sališová CSc.

Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Bratislava

5. Potravinárstvo, životné prostredie a biotechnológia

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

Prof. Ing. Štefan Schmidt, CSc.

Ústav biotechnológie a potravinárstva, FCHPT STU, Bratislava

6. CHEMPROGRESS

(Priemyselné inžinierstvo, Technológie (chemické, energetické, petrochemické, recyklačné), Alternatívne suroviny, Prepojenie vedy, priemyslu a školstva)

Prof. Ing. Martin Bajus, DrSc.

Ústav organickej chémie, katalýzy a petrochémie, FCHPT STU, Bratislava

Posterová sekcia

Prof. Ing. Michal Uher DrSc., RNDr. Katarína Javorová PhD.

PLENÁRNA PREDNÁŠKA

PP **Nicole J. Moreau** Beyond 2011- How to make IYC a long-lasting success?

ZOZNAM POZVANÝCH PREDNÁŠOK

- PP1 **Aleš Růžička** Využití sloučenin vyšších tetraenů v katalýze a materiálovém inženýrství
- PP2 **Pavel Pazdera** Pryskyřice pro průmyslovou demineralizaci vody jako pomocníci syntetického chemika
- PP3 **Jarmila Kmet'ová** Reforma vyučovania chémie na Slovensku a konfrontácia s prírodovedným vzdelávaním v Európe
- PP4 **Mária Greifová** Mikrobiálne kultúry v mliekarstve, význam a funkcie
- PP5 **Miroslav Švatarák** Príspevok konverzných procesov k zvýšeniu efektívnosti rafinérie
- PP6 **Helge Meyer** Structural and functional basis of immune response upon *Schistosoma mansoni* infection
- PP7 **Radek Cibulka** Enantioselektivní oxidace katalyzované chirálními flaviniovými solemi
- PP8 **Libor Kvítek** Nanočástice stříbra – objekt základního výzkumu i komerčních aplikací

ZOZNAM PREDNÁŠOK A POSTEROV PODĽA SEKCIÍ

Plenárna prednáška 67

- BEYOND 2011- HOW TO MAKE IYC A LONG-LASTING SUCCESS?
Nicole J. Moreau..... 67

Pozvané prednášky 67

- PP1 VYUŽITÍ SLOUČENIN VYŠŠÍCH TETRYLENŮ V KATALÝZE A MATERIÁLOVÉM
INŽENÝRSTVÍ
Aleš Růžička 67
- PP2 PRYSKYŘICE PRO PRŮMYSLOVOU DEMINERALIZACI VODY JAKO POMOCNÍCI
SYNTETICKÉHO CHEMIKA
Pavel Pazdera, Barbora Andělová, Vladimíra Datinská, Marcela Chmielová, Dana Němečková,
Markéta Procházková, Richard Ševčík, Jan Šimbera a Karel Zelinka..... 67
- PP3 REFORMA VYUČOVANIA CHÉMIE NA SLOVENSKU A KONFRONTÁCIA S
PRÍRODOVEDNÝM VZDELÁVANÍM V EURÓPE
Jarmila Kmeťová, Ľubomír Held..... 68
- PP4 MIKROBIÁLNE KULTÚRY V MLIEKARSTVE, VÝZNAM A FUNKCIE
Mária Greifová..... 68
- PP5 PRÍSPEVOK KONVERZNÝCH PROCESOV K ZVÝŠENIU EFEKTÍVNOSTI RAFINÉRIE
SLOVNAFT
Miroslav Švatarák..... 68
- PP6 STRUCTURAL AND FUNCTIONAL BASIS OF IMMUNE RESPONSE UPON *SCHISTOSOMA*
MANSONI INFECTION
Helge Meyer , Konstantinos Tripsianes, Tobias Madl , Helmut Haas, Gabriele Schramm, Michael
Sattler 69
- PP7 NANOČÁSTICE STRĚBRA – OBJEKT ZÁKLADNÍHO VÝZKUMU I KOMERČNÍCH APLIKACÍ
Libor Kvítek, Robert Pucek, Aleš Panáček, Jana Soukupová, Martina Karlíková, Milan Kolář ... 69
- PP8 ENANTIOSELEKTIVNÍ OXIDACE KATALYZOVANÉ CHIRÁLNÍMI FLAVINIOVÝMI
SOLEMI
Radek Cibulka, Tomáš Kraus, Viktor Mojr, Radek Jurok 70

Prednášky - Sekcia 1: Analytická a fyzikálna chémia 71

- 1P01 NOVÉ SMĚRY V ELEKTROANALYTICKÉ CHEMII BIOLOGICKY AKTIVNÍCH LÁTEK
Jiří Barek, Aleš Daňhel, Hana Dejmková, Dana Deýlová, Jan Fischer, Vít Novotný, Lenka
Němcová, Vlastimil Vyskočil, Oxana Yosypchuk, Jiří Zima 71
- 1P02 NOVÉ MOŽNOSTI AMPÉROMETRICKÉ DETEKCE AMINODERIVÁTŮ POLYCYKlickÝCH
AROMATICKÝCH UHLOVODÍKŮ V HPLC
Hana Dejmková, Jiří Barek, Jan Dědík, Marcela Janovcová, Lucie Maixnerová, Šárka Ramešová,
Jaroslava Zavázalová, Karolina Pecková..... 71

1P03 ELECTROCHEMICAL BIOSENSORS FOR THE DETECTION OF DNA DAMAGE CAUSED BY ORGANIC ENVIRONMENTAL POLLUTANTS <u>Vlastimil Vyskočil, Zuzana Krejčová, Mária Fařarová and Jiří Barek</u>	72
1P04 DÔLEŽITOSŤ ÚPRAVY VZORKY PRE ULTRASTOPOVÚ ANALÝZU ORGANICKÝCH POLUTANTOV <u>Andrea Hercegová</u>	72
1P05 IDENTIFICATION OF PESTICIDE RESIDUES UTILIZING CHROMATOGRAPHY AND MASS SPECTROMETRY <u>Svetlana Hrouzková</u>	73
1P06 ZÁKLADNÉ ASPEKTY A APLIKÁCIE MINIATURIZOVANÝCH ANALYTICKÝCH SYSTÉMOV V ELEKTROSEPARAČNÝCH METÓDACH <u>Marián Masár, Pavol Kruk, Milan Luc, Ladislav Danč, Michal Horčičiak, Peter Troška</u>	73
1P07 OXYGEN REDUCTION AT PLATINUM-PALLADIUM ELECTROCATALYSTS ON A CARBON SURFACE <u>Daniel Mísicak, Attila Gaal and W. Ronald Fawcett</u>	74
1P08 VYUŽITÍ DVOUROZMĚRNÉ ELEKTROFORÉZY KE STUDIU PROTEOMU DENTINU LIDSKÝCH ZUBŮ <u>Michal Jágr, Adam Eckhardt, Statis Pataridis, Ivan Mikšík</u>	75
1P09 CONCEPT OF DNA-BASED BIOSENSORS <u>Ján Labuda</u>	75
1P10 MOŽNOSTI NEPRIAMEJ VOLTAMPÉROMETRICKEJ DETEKČIE FLUORIDOVÝCH ANIÓNOV <u>Peter Tomčík, Eva Culková, Lubomír Švorc, Miroslav Rievaj, Dušan Bustin</u>	76
1P11 ŠPECIÁČNÁ ANALÝZA VYBRANÝCH PRVKOV <u>Manová Alena, Beinrohr Ernest, Čacho František, Labuda Ján</u>	76
1P12 NANOSTRUCTURED SILVER AND PLATINUM MODIFIED CARBON FIBER MICROELECTRODES COATED WITH NAFION FOR H ₂ O ₂ DETERMINATION <u>Vladimir Halouzka, Petr Jakubec, Jan Hrbac</u>	77
1P13 BINÁRNÍ MAGNETICKÉ NANOKOMPOZITY OXIDŮ ŽELEZA A NANOČÁSTIC STŘÍBRA A JEJICH ANTIMIKROBIÁLNÍ VLASTNOSTI <u>Martina Kilianová, Robert Pucek, Jiří Tuček, Aleš Panáček, Libor Kvítek, Milan Kolář</u>	77
1P14 PŘÍPRAVA NANOČÁSTIC STŘÍBRA REDUKCÍ BROMIDU STŘÍBRNÉHO <u>Petr Suchomel, Libor Kvítek, Aleš Panáček, Robert Pucek</u>	78
1P15 SRÁŽENÍ A STABILIZACE NANOČÁSTIC SULFIDU ZINEČNATÉHO NA MONTMORILLONITU, MOŽNOSTI VYUŽITÍ PRO FOTOREDUKCI OXIDU UHLIČITÉHO <u>Petr Praus, Richard Dvorský, Ondřej Kozák, Kamila Kočí, Stanislav Bartusek</u>	78
1P16 PŘÍPRAVA NANOAGREGÁTŮ NC ₆₀ Z KOLOIDNÍ NANODISPERZE (C ₆₀ +TOLUEN)-H ₂ O <u>Richard Dvorský, Jana Trojková, Petr Praus</u>	79
1P17 CONDUCTING PROPERTIES OF EXTENDED VIologen MOLECULES <u>Magdaléna Hromadová, Viliam Kolivoška, Miroslav Gál, Lubomír Pospíšil, Michal Valášek</u>	80

1P18 EPR SPIN TRAPPING TECHNIQUE – A POWERFUL TOOL IN THE INVESTIGATIONS OF PHOTOINDUCED PROCESSES <u>Vlasta Brezová</u> , Zuzana Barbieriková, Maroš Bella, Viktor Milata, Andrej Staško.....	80
1P19 ŠTÚDIUM INFRAČERVENÝCH SPEKTIER JEDNODUCHÝCH ZLÚČENÍN POMOCO EXPERIMENTÁLNYCH MERANÍ A TEORETICKÝCH VÝPOČTOV <u>Daniel Zich</u> , Ivan Černušák, Marián Matejdes, Ignác Bugár, Marian Janek	81
1P20 PROCESSES IN CONDENSED PHASE AND NON-ARRHENIAN KINETICS <u>Peter Šimon</u>	81
1P21 DIELEKTRICKÉ VLASTNOSTI VODÍKOVÝCH SENZORŮ NA BÁZI STRUKTUR TYPU MOS <u>Fedor Šrobár</u> , Olga Procházková	82
1P22 MOŽNOSTI VYUŽITIA 2D KVAPALINOVEJ CHROMATOGRAFIE NA CHARAKTERIZÁCIU HUMÍNOVÝCH LÁTOK <u>Góra R.</u> , Hutta M., Rohárik P., Masaryková N.....	82
1P23 STANOVENIE D-SORBITOLU BIOSENZOROM PRIPRAVENÝM POMOCO BIONANOKOMPOZITU <u>Jana Šefčovičová</u> , Jaroslav Filip, Peter Gemeiner, Ján Tkáč.....	83
1P24 ELECTROCHEMICAL PRETREATMENT OF CARBON FIBER MICROELECTRODE BASED ON SINUSOIDAL-WAVE POTENTIAL CYCLING AND ITS APPLICATION TO AMPEROMETRIC SENSING <u>Petr Jakubec</u> , Jan Hrbac, David Jirovsky, Daniel Riman, Vladimír Halouzka, , Zdenka Bartosova, Vlastimil Masek, Peter Mojzes, Jan Vacek.....	84
1P25 ANALÝZA VZORIEK ŽIVOTNÉHO PROSTREDIA AFINITNOU CHROMATOGRAFIOU NA IMOBILIZOVANÝCH IÓNOCH KOVU <u>Radoslav Halko</u>	84
1P26 MODELOVANIE A INTERPRETÁCIA NANOTRIBOLÓGIE POMOCO DFT <u>Robert Turanský</u> , Ján Brndiar, Ivan Štich.....	85
Prednášky - Sekcia 2: Anorganická a materiálová chémia 85	
2P01 PHASES OF K_2TAF_7 AND K_3TAF_8 <u>Miroslav Boča</u> , Blanka Kubíková, František Šimko, Iveta Macková, Ján Moncol	85
2P02 ODOLNOSŤ ZIRKÓNIOVÝCH ZLIATIN V ROZTAVENÝCH FLUORIDOVÝCH SOLIACH <u>Peter Barborík</u> , Miroslav Boča	86
2P03 HIGH PURITY INP LAYERS OF BOTH CONDUCTIVITY TYPES PREPARED BY EXPLOITING PR ADDITION INTO THE LPE GROWTH MELT <u>Jiří Zavadil</u> , Olga Procházková, Jan Grym, Karel Žďánský	86
2P04 ŠTÚDIUM ŠTRUKTÚRY FLUORIDOVÝCH SÚSTAV POMOCO NMR SPEKTROSKOPIE <u>František Šimko</u> , Aydar Rakhmatullin, Catherine Bessada	87
2P05 ZLÚČENINY CHRÓMU V NÍZKOTAVITEĽNÝCH ELEKTROLYTOCH NA VÝROBU HLINÍKA <u>Vladimír Danielik</u> , Pavel Fellner, Dáša Šuleková	87

2P06 THE INFLUENCE OF LOCALIZED SURFACE PLASMONS ON THE PHOTOLUMINESCENCE PROPERTIES OF METAL-COATED INP <u>Olga Procházková, Jiří Zavadil, Jan Grym, Martin Koštej</u>	88
2P07 ANTIMIKROBIÁLNÍ AKTIVITA A TOXICITA NANOČÁSTIC STRĚBRA <u>Aleš Panáček, Libor Kvítek, Robert Pucek, Milan Kolář</u>	88
2P08 REKRYSTALIZACE NANOČÁSTIC STRĚBRA A JEJICH POUŽITÍ V POVRCHEM ZESÍLENÉ RAMANOVÉ SPEKTROSKOPII <u>Robert Pucek, Ariana Fargašová, Aleš Panáček, Libor Kvítek</u>	89
2P09 TENKÉ VRSTVY OXIDU ZINEČNATÉHO PŘIPRAVENÉ METODOU MOVPE <u>Zdeněk Sofer, David Sedmidubský, Filip Šaněk, Štěpán Huber, Ladislav Nádherný, Miroslav Maryško, Jiří Hejtmánek, Karel Jurek, Martin Mikulics</u>	89
2P10 KOALESCENCE V TAVENINÁCH POLYMERNÍCH SMĚSÍ <u>Josef Jůza, Ivan Fortelný, Bojan Dimzoski</u>	90
2P11 C, N-CHELATOVANÝ STANNYLEN A JEHO REAKTIVITA SE SILOXANY <u>Zdeňka Padělková, Aleš Růžička a Aneta Zouharová</u>	90
2P12 ACYLFERROCENY JAKO SIKATIVA PRO ALKYDOVÉ NÁTĚRY <u>Milan Erben, Jaromír Vinklárek, Petr Kalenda, David Veselý</u>	90
2P13 ELEKTROCHEMICKÉ CHOVÁNÍ AMINOKARBENOVÝCH KOMPLEXŮ CR(0) A FE(0) S HETEROCYKLIČKÝM SUBSTITUENTEM <u>Radka Metelková, Tomáš Tobrman, Jiří Ludvík, Irena Hoskocová</u>	91
2P14 SYNTÉZA, CHARAKTERIZACE A CYTOTOXICKÁ AKTIVITA VANADOCENOVÝCH KOMPLEXŮ S N,N-CHELÁTUJÍCÍMI LIGANDY <u>Jaromír Vinklárek, Hana Hurychová, Veronika Jůzová, Zdenka Padělková, Jan Honzíček, Aleš Eisner</u>	92
2P15 UNUSUAL MIXED-VALENCE AND MIXED-CATION ANTIFERROMAGNETIC FLUOROSULFATES OF SILVER(II) <u>Tomasz Michałowski, Wojciech Grochala</u>	93
2P16 MONTMORILLONIT A JEHO ORGANODERIVÁTY JAKO ADSORBENTY KOVŮ <u>Eva Vítámvášová, Adriana Plačková, Eva Plevová, Zuzana Navrátilová, Lenka Vaculíková</u>	93
2P17 THE COORDINATION COMPOUNDS CU(II) WITH PYRIDYLMETHANOLS <u>Marian Koman, Ján Moncol', Dušan Valigura and Jaroslava Maroszová</u>	94
2P18 ZMENA REAKČNÝCH PODMIENOK, CESTA K VZNIKU RÔZNYCH SUBSTITUOVANÝCH BENZOÁTOMEĎNATÝCH KOMPLEXOV S N,N-DIETYLNKOTÍNAMIDOM <u>Jana Medvecká, Ján Moncol', Dušan Valigura</u>	94
2P19 RESONANCE ENERGY TRANSFER IN THIN FILMS PREPARED USING LAYER-BY-LAYER ASSEMBLY <u>Adriana Czímerová, Juraj Bujdák</u>	95
2P20 ADSORPCE PB ^{II} , CU ^{II} A CR ^{III} NA ŽELEZITÝCH SRAŽENINÁCH <u>Roman Maršálek</u>	95

2P21 PRÍPRAVA A VLASTNOSTI KOMPOZITNEJ SIC – CNT KERAMIKY <u>M. Hnatko</u> , Evelyn A. Bolaños C., Š. Kavecký, Z. Jonšta, P. Šajgalík	96
2P22 CHARACTERIZATION OF ORGANO-MONTMORILLONITES BY NEAR-INFRARED SPECTROSCOPY <u>Jana Madejová</u> , Ľuboš Jankovič, Peter Komadel.....	96
2P23 SUPRAMOLECULAR HYDROGEN-BONDING NETWORKS AND ISOMERISM OF MONOMERIC COPPER(II) HALOGENBENZOATES WITH NICOTINAMIDE Jozef Halaška, Marian Koman, <u>Ján Moncol'</u>	96

Prednášky - sekcia 3: Organická chémia a polyméry..... 97

3P01 PLASTY AKO ZRANITELNÁ ČASŤ NIEKTORÝCH UMELECKÝCH ARTEFAKTOV <u>Lyda Rychlá</u> , Jozef Rychlý, Ivica Janigová, Katarína Csomorová	97
3P02 TEPELNĚ ODOLNÉ PRYSKYŘICE KYANÁTOVÉHO TYPU JAKO NOSIČE PRO IDENTIFIKAČNÍ TĚLÍŠKA <u>Ľuboš Prokůpek</u> , Miroslav Večeřa, Radka Adámková	98
3P03 EFFECT OF PRINTING INKS ON THE THERMOOXIDATIVE STABILITY OF WHATMAN PAPER USING SIMULTANEOUS DTA/TG METHODS <u>András Peller</u> , Milena Reháková, Katarína Vizárová, Peter Šimon.....	98
3P04 FOTOCHEMICKY URÝCHLENÁ DEGRADÁCIA POLY(E- KAPROLAKTÓNU) <u>Katarína Borská</u> , Martin Danko, Ivica Janigová, Jaroslav Mosnáček	98
3P05 NOVEL APPROACH TO THE SEPARATION AND MOLECULAR CHARACTERIZATION OF POLYMER SYSTEMS – SEQUENCED TWO-DIMENSIONAL LIQUID CHROMATOGRAPHY <u>Alena Šišková</u> , Dušan Berek.....	99
3P06 SYNTHESIS, PROPERTIES AND APPLICATION OF HIGHLY STERICALLY HINDERED BINAPHTHALENE-BASED MONOPHOSPHANE LIGANDS Michaela Mešková, <u>Martin Putala*</u>	100
3P07 NEW ROUTE TOWARDS (PENTAFLUOROSULFANYL)BENZENES <u>Petr Beier</u> , George Iakobson, Norbetr Vida, Tereza Pastýřiková	100
3P08 STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA MYCESTERICÍNOV D-G <u>Alena Uhríková</u> , Beáta Oroszová, Margaréta Kováčová, Simona Podolínska, Jana Špaková Raschmanová, Miroslava Martinková, Jozef Gonda	101
3P09 PRÍPRAVA KONCENTROVANÉHO DICYKLOHEXYLAMÍNU PRI VÝROBE CYKLOHEXYLAMÍNU Z ANILÍNU V KVAPALNEJ FÁZE NA RUTÉNIOVOM KATALYZÁTORE <u>Ján Uhlár</u> , Ivan Mačák, Milan Králik, Michal Štefanko	102
3P10 NOVEL ACRIDINES WITH ANTITUMOR AND ANTICHOLINESTERASE ACTIVITY <u>Ján Imrich</u> , Slávka Hamuláková, Ladislav Dražna, Lucia Maľučká, Mária Vilková, Marianna Vargová, Ladislav Janovec, Mária Vojtičková.....	103

3P11 STUDIUM FÁZOVÉHO PŘECHODU KLUBKO-GLOBULE VE VODNÝCH ROZTOCÍCH TERMORESPONZIVNÍCH POLYMERŮ NMR METODAMI <u>Jiří Spěváček</u>	103
3P12 RÖNTGENOVÁ FOTOELEKTRONOVÁ SPEKTROSKOPIA A MOŽNOSTI JEJ VYUŽITIA <u>Mária Omastová, Matej Mičušík</u>	104
3P13 VÍCESTUPŇOVÉ SMĚROVÁNÍ AUGEROVA ZÁŘIČE ¹²⁵ I DO DNA NÁDOROVÝCH BUNĚK POMOCÍ POLYMERNÍHO NOSIČOVÉHO SYSTÉMU <u>Martin Hrubý, Ondřej Sedláček, Martin Studenovský, Jan Kučka, David Větvička, Lubomír Kovář, Karel Ulbrich</u>	104
3P14 ORGANIC FIELD EFFECT TRANSISTORS FROM TRIARYLAMINE SUBSTITUTED ARYLENE BISIMIDES <u>Renata Rybakiewicz, Renji R. Reghu, David Djurado, Hubert Cybulski, Juozas V. Grazulevicius, Irena Kulszewicz-Bajer, Damien Boudinet, Jean-Marie Verilhac, Malgorzata Zagorska, Adam Pron</u>	105
3P15 PROMĚNY MOLEKULÁRNÍ STRUKTURY POLYANILINEM POKRYTÝCH UHLÍKOVÝCH NANOTRUBEK V PRŮBĚHU KARBONIZACE <u>Zuzana Rozlívková, Elena N. Konyushenko, Miroslava Trchová, Jaroslav Stejskal</u>	105
3P16 PHOTOACTUATING NANOCOMPOSITES BASED ON BLOCK COPOLYMERS AND COVALENTLY MODIFIED MULTIWALLED CARBON NANOTUBES <u>Markéta Ilčíková, Miroslav Mrlík, Dušan Chorvát, Matej Mičušík, Tomáš Sedláček, Katarína Csomorová, Jaroslav Mosnáček</u>	106
3P17 ANTITUBERKULOTIKA 21. STOLETÍ <u>Jarmila Vinšová</u>	106
3P18 COILED COIL MOTIV JAKO UNIVERZÁLNÍ SPOJKA PRO VAZBU REKOMBINANTNÍCH PROTEINŮ NA POLYMERNÍ LÉČIVA <u>Michal Pechar, Robert Pola, Karel Ulbrich, Lucie Bednářová, Petr Maloň, Vlastimil Král, Irena Sieglová, Milan Fábry, Ondřej Vaněk, Martina Kabešová, Luboš Kovář</u>	107
3P19 HYDROGÉLY MODIFIKOVANÉ PEPTIDMI PRE ZLEPŠENIE IMUNOLOGICKEJ OCHRANY ENKAPSULOVANÝCH BUNIEK <u>Andrea Ďuračková, Slávka Bekešová, Ľudovít Škultéty, Igor Lacík</u>	108
3P20 „CLICK & SEED“ STRATEGIE BIOMIMETICKÉ MODIFIKACE MATERIÁLŮ <u>Vladimír Proks, Josef Jaroš, Ognen Pop-Georgievski, Jan Kučka, Štěpán Popelka, Aleš Hampl, František Rypáček</u>	108
3P21 POLYETYLÉN UPRAVENÝ VYBRANÝMI ANTIBAKTERIÁLNÝMI LÁTKAMI S VYUŽITÍM NÍZKOTEPLOTNEJ PLAZMY <u>Anton Popelka, Igor Novák, Marián Lehocký, Angela Kleinová, Milena Špírková, Ivan Chodák</u>	109
3P22 ENZYMATIC ACYLATIONS OF GLUCOSIDES BY PHENOLIC ACIDS AND THEIR ANALOGUES <u>Mária Mastihubová</u>	109
3P23 ELEKTROCHEMICKÁ REDUKCE MOLEKUL S VÍCE REDOXNÍMI CENTRY: MONO-, DI-, TRI- A TETRANITROKALIX[4]ARENY A JEJICH MODELOVÉ NITROBENZENY <u>Alan Liška, Jiří Ludvík, Albert J. Fry</u>	110

3P24 SPEKTRO-ELEKTROCHEMICKÁ STUDIE FOX-7 V APROTICKÉM PROSTŘEDÍ <u>Ludmila Šimková, Jiří Ludvík, Jiří Klíma</u>	111
3P25 VZTAH STRUKTURA-VLASTNOSTI A NELINEÁRNĚ OPTICKÉ EFEKTY V DONOR 5,6-DISUBSTITUOVANÝCH PYRAZIN-2,3-DIKARBONITRILECH <u>Filip Bureš, Hana Čermáková, Jiří Kulhánek, Miroslav Ludwig</u>	111
3P26 NOVÝ SOFISTIKOVANÝ ZPŮSOB SYNTÉZY 1-PYRID-4-YL-PIPERAZINU A JEHO DERIVÁTU JAKO STAVEBNÍCH BLOKŮ PRO IMOBILIZOVANÉ KATALYTICKÉ SYSTÉMY <u>Barbora Andělová, Procházková Markéta, Pazdera Pavel</u>	112
3P27 SYNTÉZY 1,1-DISUBSTITUOVANÝCH PIPERAZIN-1-IOVÝCH SOLÍ <u>Dana Němečková, Barbora Andělová, Markéta Procházková a Pavel Pazdera</u>	113

Prednášky - sekcia 4: Vyučovanie a história chémie 113

4P01 225 ANNIVERSARY OF THE 1 ST INTERNATIONAL SCIENTIFIC CONGRESS – SLOVAKIA, SKLENÉ TEPLICE <u>Ivan Herčko, Dušan Velič, Marta Sališová and Viktor Milata</u>	113
4P02 ČO BY MALI VEDCI VEDIEŤ O KOMUNIKÁCI S VEREJNOSŤOU? <u>Ján Reguli</u>	114
4P03 35 ROKOV TVORBY UČEBNÍK CHÉMIE PRE ZŠ U NÁS <u>Emil Adamkovič</u>	114
4P04 MOŽNOSTI A RIZIKA VYUŽÍVÁNÍ POČÍTAČOVÝCH ANIMACÍ A SIMULACÍ V POČÁTEČNÍ VÝUCE CHEMIE <u>Martin Bílek</u>	115
4P05 VYUČOVANIE CHÉMIE V DIGITÁLNEJ ŠKOLE <u>Mgr. Katarína Javorová, Milica Križanová, Beáta Brestenská</u>	115
4P06 CHÉMIA V KVÁDRI (POČÍTAČA) <u>PaedDr. Ivan Hnát</u>	116
4P07 MÁ SMYSL UČIT PŘEDMĚT CHEMICKÁ INFORMATIKA? <u>Jaroslav Šilhánek</u>	116
4P08 PODPORA ODBORNÉHO VZDĚLÁVÁNÍ A ROZVOJE VĚDECKOVÝZKUMNÉHO TÝMU CENTRA MATERIÁLOVÉHO VÝZKUMU NA UNIVERZITĚ PARDUBICE <u>S. Valková, T. Wágner, L. Vítková, M. Vejchodová, M. Frumar</u>	116

Prednášky - sekcia 5 Potravinárstvo, životné prostredie a biotechnológia 117

5P01 LIPIDS IN HUMAN NUTRITION <u>Ján Šajbidor</u>	117
5P02 <i>RHIZOPUS ORYZAE</i> – A NOVEL SOURCE OF FISH FEED AND THEIR LIPID PROFILE <u>Lucia Zahradnikova, Torbjörn Lundh, Anders Kiessling, Lars Edebo, Jana Pickova</u>	117

5P03 TERMOSTABILITA CIS IZOMERŮ LUTEINU <u>Barbora Hrvolová, Jiří Kalina</u>	118
5P04 FERMENTACE SÓJI BAKTERIEMI MLÉČNÉHO KVAŠENÍ Lenka Knorová, Šárka Horáčková, Eva Dvořáková, Ivana Sosnovcová, Věra Schulzová, <u>Milada Plocková</u>	118
5P05 VÝVOJ HPLC-DAD METODY STANOVENÍ VYBRANÝCH FENOLICKÝCH LÁTEK A JEJÍ APLIKACE PŘI STUDIU VLIVU RŮZNÝCH RADIAČNÍCH PODMÍNEK NA JEJICH AKUMULACI V LISTECH JEČMENE JARNÍHO <u>Jakub Nezval, Jiří Kalina</u>	119
5P06 TERMICKÉ VYUŽITÍ BIOMASY PROCESEM PARCIÁLNÍ OXIDACE <u>Michael Pohořelý, Michal Jeremiáš, Petra Kameníková, Karel Svoboda, Sjarhei Skoblia, Michal Šyc, Miroslav Punčochář</u>	119
5P07 VYUŽITÍ ODPADNÍCH BIOMATERIÁLŮ K SORPCI TOXICKÝCH OXOANIONTŮ ARSENU, SELENU A ANTIMONU Z KONTAMINOVANÝCH VOD <u>Barbora Doušová, Bohumila Jakubíková, Ivo Šafařík, Stanislava Krejčová, David Koloušek, Miloslav Lhotka, Vladimír Machovič</u>	120
5P08 AKTINOLIT – AZBESTOVÝ MINERÁL V ŽIVOTNÍM PROSTŘEDÍ NA PLZEŇSKU A JEHO DETEKCE PRÁŠKOVOU RENTGENOVOU DIFRAKČÍ <u>David Havlíček, Miroslav Klán, Jiří Plocek</u>	121
5P09 SLEDOVANIE ZÁVISLOSTI BIOCHEMICKÝCH UKAZOVATEĽOV OD KONCENTRÁCIE OZÓNU <u>Marián Schwarz, Vladimír Lalík</u>	121
5P10 MAGNETICALLY RESPONSIVE BIOCOMPOSITES FOR ENVIRONMENTAL TECHNOLOGY AND BIOTECHNOLOGY <u>Ivo Safarik, Katerina Horska, Kristyna Pospiskova, Mirka Safarikova</u>	122
5P11 METHODS FOR EDIBLE FATS AND OILS SHELF LIFE DETERMINATION AND PREDICTION <u>Štefan Schmidt, Lenka Vrbíková, František Krepš, Jarmila Hlásniková, Ivana Kolesárová, Stanislav Sekretár, Július Annus</u>	122
5P12 ELEKTROFORETICKÉ MONITOROVÁNÍ AMINOKYSELIN PRO KLINICKÉ ÚČELY <u>Petr Tůma, Eva Samcová, Vlastimil Jurka</u>	123
5P13 FALSE-POSITIVE AND FALSE-NEGATIVE BLOODSTAIN DETECTION <u>Martina Bancířová, Eva Ratajová</u>	123
5P14 ANALYTICKÁ CHEMIE V FYZIOLOGII ROSTLIN <u>Jiří Kalina, Jakub Nezval, Barbora Hrvolová, Michala Zgarbová</u>	124
5P15 QM/MM STUDIES OF HAIRPIN RIBOZYME SELF-CLEAVAGE SUGGEST THE FEASIBILITY OF MULTIPLE COMPETING REACTION MECHANISMS INVOLVING IONIZED FORMS OF NUCLEOTIDES G8 AND A38 <u>Vojtěch Mlýnský, Pavel Banáš, Nils G. Walter, Jiří Šponer, and Michal Otyepka</u>	124

Prednášky - sekcia 6 CHEMPROGRESS..... 125

6P01 LABORATÓRNA, POLOPREVÁDZKOVÁ A PREVÁDZKOVÁ PYROLÝZA OJAZDENÝCH PNEUMATÍK NA CHEMIKÁLIE A PALIVÁ NA SLOVENSKU <u>Martin Bajus</u> , Elena Hájeková	125
6P02 ANALÝZA PYROLÝZY VYSOKOVROUČÍCH SUROVIN MATEMATICKÝM MODELEM S AUTOMATICKÝM GENEROVÁNÍM SÍTĚ REAKCÍ <u>Petr Zámotný</u> , Adam Karaba, Zdeněk Bělohav.....	125
6P03 SPOLOČNE SPLYNOVÁNÍ ROPNÝCH ZBYTKŮ A BIOMASY doc. Ing. <u>Jaromír Lederer</u> , CSc., Ing. Václav Veselý CSc., Ing. Dušan Kovač,	126
6P04 FISCHER-TROPSCHOVA SYNTÉZA - PŘÍPRAVA A HODNOCENÍ PRODUKTŮ Vlastimil Rubáš, David Kubička, <u>Lukáš Hora</u> , Kamil Jiša, Pavel Šimáček	126
6P05 METHODOLOGY FOR IMPROVING ENERGY EFFICIENCY OF A CHEMICAL PLANT <u>Jaroslav Poživil</u> , Vladimír Hanta	127
6P06 NETRADIČNÉ VYUŽITIE SOLÁRNEJ ENERGIE <u>Anna Michalíková</u> , Jozef Fiala	127
6P07 DVOJROZMĚRNÝ DYNAMICKÝ MATEMATICKÝ MODEL DEGRADACE KATALYTICKÉ VRSTVY V PALIVOVÉM ČLÁNKU TYPU PEM <u>Monika Drakselová</u> , Roman Kodým, Svein Sunde, Karel Bouzek	128
6P08 PŘÍPRAVA DICYKLOHEXYLAMÍNU HYDROGENÁCIOU DIFENYLAMÍNU Peter Toman, <u>Štefan Wenchich</u> , Ján Uhlár	128
6P09 VÝVOJ KERAMICKÝCH NOSIČŮ KATALYZÁTORŮ PRO ANODICKÝ VÝVOJ KYSLÍKU V ELEKTROLYZÉRU PRO ROZKLAD VODY S POLYMERNÍM ELEKTROLYTEM <u>Jakub Polonský</u> , Carsten Prag, Aleksey Nikiforov, Irina Petrushina, Erik Christensen	129
6P10 CHARAKTERIZACE ANION SELEKTIVNÍCH HETEROGENNÍCH MEMBRÁN <u>Matin Prokop</u> , Jaromír Hnát, Martin Paidar	129
6P11 BEZPEČNÁ VYSOKOFREKVENČNÁ VENTILÁCIA, ELIMINÁCIA RIZÍK NOZOKOMIÁLNYCH NÁKAZ A BIOKOMPATIBILITA POVRCHOVEJ ÚPRAVY INOVAČNÝCH MATERIÁLOV <u>Eleonóra Benčíková</u> , Marián Berešík	130
6P12 VLASTNOSTI NAFIONU ZA ZVÝŠENÉHO TLAKU A TEPLoty <u>Jakub Mališ</u> , Martin Paidar, Karel Bouzek	130
6P13 ALKALICKÁ ELEKTROLÝZA VODY S MEMBRÁNOU NAFION <u>Karel Vazač</u> , Martin Paidar, Karel Bouzek.....	131
6P14 VLIV ANION-SELEKTIVNÍHO POLYMERNÍHO POJIVA NA VLASTNOSTI ANODY OBSAHUJÍCÍ NEPLATIONOVÉ KATALYZÁTORY PŘI ALKALICKÉ ELEKTROLÝZE VODY <u>Karel Bouzek</u> , Jaromír Hnát, Martin Paidar, Jana Jiroušová, Jan Schauer, Jan Žitka	131

6P15 POVRCHOVÉ A ADHÉZNE VLASTNOSTI SUBSTRÁTOV V SPOJI DREVOTRIESKOVÁ DOSKA - PVC FÓLIA LEPENOM POLYURETÁNOVÝM ADHEZÍVOM <u>Igor Novák</u> , Vladimír Vanko, Jozef Preťo, Zuzana Hloušková, Ivan Chodák	132
6P16 MOŽNOSTI NÁHRADY KARCINOGENNÝCH OLEJOV V GUMÁRENSKOM PRIEMYSLE <u>Milan Olšovský</u> , Radovan Drábik, Branislav Cívik.....	132
6P17 SEPARACE TĚŽKÝCH KOVŮ Z ODPADNÍCH VOD V KOVOHUTÍCH PŘÍBRAM REDUKČNĚ-SORPČNÍM POSTUPEM <u>Ladislav Kudrlička</u> , Jana Kovačová, Petr Pistulka, Vladimír Plucha	133
6P18 SPOLUPRÁCE AKADEMICKÉ SFÉRY S PRŮMYSEM HRST POCITŮ, ÚVAH A ZKUŠENOSTÍ Bohumil Kratochvíl	133
6P19 SOUČASNOST A PERSPEKTIVY ODBORNÉ SKUPINY TERMICKÉ ANALÝZY <u>Petra Šulcová</u> a Jiří Málek	134
6P20 GLYCEROL JAKO SUROVINA PRO VÝROBU KOMPONENT PRO MOTOROVÁ PALIVA Ing. <u>Jiří Kolena</u> , CSc., Ing. Pavel Morávek , Ing. Pavel Šimáček, PhD.	134
6P21 SURFACE PROPERTIES OF POLY(IMIDE-CO-SILOXANE) - BASED ADHESIVES <u>Igor Novák</u> , Petr Sysel, Ivan Chodák, Anton Popelka, Milena Špírková, Angela Kleinová, Štěpán Florián.....	135

Prednášky Cena Shimadzu 2011 136

ANALYTICAL POTENTIAL OF PREPARATIVE ISOTACHOPHORESIS IN COLUMN - COUPLING CONFIGURATION WITH MASS SPECTROMETRY IN ANALYSIS OF PROTEINS <u>Monika Kondeková</u> , Andrea Staňová, Jozef Marák, Dušan Kaniansky	136
STUDIUM INTERAKCE SANGUILUTINU S DNA POMOCÍ FLUORESCENČNÍ SPEKTROSKOPIE Stanislava Rybáková, Jana Urbanová, Petr Táborský.....	136
VYUŽITIE ELEKTROFORETICKÝCH ČIPOV V ANALÝZE ENVIROMENTÁLNYCH A BIOLOGICKÝCH VZORIEK <u>Michal Horčičiak</u> , Marián Masár, Peter Troška.....	137
DEVELOPMENT AND APPLICATION OF CRYSTALLIC SILVER AMALGAM WORKING ELECTRODES IN VOLTAMMETRY AND AMPEROMETRY <u>Aleš Daňhel</u> , Jana Tvrđíková, Jiří Barek	137
VYUŽITÍ MODERNÍCH EXTRAČNÍCH METOD PŘI ANALÝZE BEZDÝMNÝCH PRACHŮ <u>Ondřej Fryš</u> , Aleš Eisner, Petra Bajerová a Karel Ventura.....	138
ZOBRAZOVACÍ HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIE KUTIKULÁRNÍCH LIPIDŮ OCTOMILKY OBECNĚ <u>Filip Kaftan</u> , Vladimír Vrkoslav, Josef Cvačka a Aleš Svatoš	138
SPOJENIE SEPARAČNÝCH TECHNÍK IZOTACHOFORÉZY A KAPILÁRNEJ ZÓNOVEJ ELEKTROFORÉZY S LASEROM INDUKOVANOU FLUORESCENČNOU DETEKCIU PRE VYSOKOCITLIVÉ STANOVENIE CHINÍNU V KLINICKÝCH MATRICIACH <u>Juraj Piešťanský</u> , Peter Mikuš, Katarína Maráková, Lucia Veizerová	139

MONITORING NIEKTORÝCH NEUROLOGICKÝCH OCHORENÍ KAPILÁRNOU ELEKTROFORÉZOU NA ČIPE <u>Peter Troška</u> , Marián Masár, Michal Horčíciak, Richard Chudoba, Dušan Kaniansky.....	139
STUDIUM FLAVONOIDNÍCH GLYKOSIDŮ PO HYDROLÝZE METODOU HPLC-DAD-ELSD ZAMĚŘENÉ NA IDENTIFIKACI CUKERNÉ SLOŽKY <u>Věra Javorková</u> , Jiří Pazourek	140
CDS NANOPARTICLES ON MONTMORILLONITE AND THEIR PHOTOCATALYTIC PROPERTIES <u>Ondřej Kozák</u> , Petr Praus, Kamila Kočí	140
Postery - sekcia 1 Analytická a fyzikálna chémia 141	
1Po01 PHOTOINDUCED PROCESSES OF 2,1,3-BENZOSELENADIAZOLE, 2,1,3- BENZOTHIADIAZOLE AND THEIR NITRO AND AMINO DERIVATIVES <u>Zuzana Barbieriková</u> , Maroš Bella, Viktor Milata, Andrej Staško, Dana Dvoranová, Vlasta Brezová.....	141
1Po02 UV-VIS STUDY OF CAMPTOTHECIN <u>Miroslava Bobeničová</u> , Stanislava Šoralová, Dana Dvoranová, Martin Breza.....	142
1Po03 SEPARÁCIA A IZOLÁCIA ENZÝMU PREPARATÍVNOU KAPILÁRNOU IZOTACHOFORÉZOU <u>Róbert Bodor</u> , Ivana Sedláčková, Helena Smelíková, Katarína Mikušová, Martina Beláňová.....	142
1Po04 EUROPIUM(III)/AMERICIUM(III) EXTRACTION WITH NEW DERIVATIVES OF COBALT BIS(DICARBOLLIDE) B-SUBSTITUTED WITH HALOGEN AND DIPHENYL-N-TERT- OCTYL-CARBAMOYLMETHYLPHOSPHINE OXIDE <u>Mária Bubeníková</u> , Pavel Selucký, Jiří Rais, Petr Švec, Bohumír Grüner	143
1Po05 OMEZENÍ TRANSPORTNÍCH ZTRÁT PŘI STANOVENÍ KADMIA TECHNIKOU ELEKTROCHEMICKÉHO GENEROVÁNÍ JEHO TĚKAVÉ FORMY ZAVÁDĚNÉ DO KŘEMENNÉHO ATOMIZÁTORU AAS <u>Václav Červený</u> , Darina Kováčová, Jakub Hraníček, Petr Rychlovský	143
1Po06 VPLYV ELEKTRICKÉHO PROTIPRÚDU NA ELEKTROFORETICKÚ SEPARÁCIU LÁTKO PODOBNÝCH FYZIKÁLNO-CHEMICKÝCH VLASTNOSTÍ PRÍTOMNÝCH V KOMPLEXNÝCH ENVIRONMENTÁLNYCH A BIOLOGICKÝCH MATRICIACH <u>Ladislav Danč</u> , Marián Masár.....	144
1Po07 CONSTRUCTION OF COULOMETRIC DETECTOR BASED ON GLASSY CARBON BEADS <u>Hana Dejmková</u> , Jiri Barek, Jiri Zima	144
1Po08 VOLTAMETRICKÉ STANOVENÍ 2-AMINO-6-NITROBENZOTHAZOLU NA BISMUTOVÉ FILMOVÉ ELEKTRODĚ <u>Dana Deýlová</u> , Anastasio Economou, Jiří Barek	145
1Po09 SORPTION OF NITRATE AND CUPRIC AND LEAD IONS ONTO LIGNITE HUMIC ACIDS <u>Leoš Doskočil</u> , Soňa Konečná, Martina Klučáková	145
1Po10 VÝVOJ CITLIVÉ A SELEKTIVNÍ METODY PRO STANOVENÍ PERFLUOROVANÝCH KYSELIN VE VZORCÍCH ŘÍČNÍ VODY ČR POMOCÍ PLYNOVÉ CHROMATOGRRAFIE <u>Veronika Dufková</u> , Radomír Čabala.....	146

1Po11 OPTIMALIZACE TLAKOVÉ EXTRAKCE ROZPOUŠTĚDLEM PRO IZOLACI ADITIV VYSOKOENERGETICKÝCH MATERIÁLŮ <u>Eisner Aleš</u> , Peterová Jana, Ondřej Fryš, Bajerová Petra, Adam Martin, Karel Ventura	146
1Po12 VOLTAMMETRIC DETERMINATION OF ACETYLSALICYLIC ACID AND SALICYLIC ACID ON CARBON FILM ELECTRODE Abdul Rauf Khaskheli, <u>Jan Fischer</u> , Jiří Barek, Sirajuddin, Muhammad Iqbal Bhangar.....	147
1Po13 NÁPLŇOVÉ KAPILÁRNÍ KOLONNY PRO HPLC <u>Martin Franc</u> , Zuzana Bosáková, Pavel Coufal	147
1Po14 VYUŽITÍ MODERNÍCH EXTRAČNÍCH METOD PŘI ANALÝZE BEZDÝMNÝCH PRACHŮ <u>Ondřej Fryš</u> , Aleš Eisner, Petra Bajerová a Karel Ventura.....	148
1Po15 ACRIDINE DERIVATIVES AS METAL-CHELATORS AND RADICAL-SCAVENGERS Lukáš Gaľa, Ladislav Dražna, Ján Imrich, Marián Valko	148
1Po16 SELECTED RADIOSENSITIZERS STUDIED BY MEANS OF THE ELECTROCHEMICAL METHODS Miroslav Gáll, Viliam Kolivoška ¹ , Marta Ambrová ² , Ján Híveš ² , Romana Sokolová ¹	148
1Po17 ÚVOD DO NANOTECHNOLÓGIE: RASTROVACIA SONDOVÁ MIKROSKOPIA FYLOSILIKÁTU MUSKOVIT Ján Goruška, Dušan VeličDaniel Repovský	149
1Po18 ŠTÚDIUM VPLYVU PERTURBANTOV NA NEKATALYZOVANÚ OSCILAČNÚ REAKCIU 1,4-CYKLOHEXÁNDIÓNU S BROMIČNANOM V KYSLOM PROSTREDÍ Oľga Grančičová, Anna Olexová, Erik Szabo, Peter Ševčík	149
1Po19 EXPERIMENTÁLNE A TEORETICKÉ ŠTÚDIUM INTERAKCIÍ DVOJMOCNÝCH IÓNOV V PROSTREDÍ VODA-ACETONITRIL <u>Soňa Halászová</u> , Oľga Vollárová, Ján Benko, Monika Jerigová, Ivan Černušák	150
1Po20 SPEKTROCHEMICKÉ SLEDOVANIE NEČISTÔT V KATALYZÁTOROCH Ashraf Mustafa M. Abusenaina, Karol Flórián, <u>Miroslava Hámbořská</u> , Viera Vojteková.....	150
1Po21 ELECTROCHEMICAL GENERATION OF VOLATILE FORM OF SILVER IN ATOMIC ABSORPTION SPECTROMETRY <u>Jakub Hraníček</u> , Ondřej Linhart, Václav Červený, Petr Rychlovský.....	151
1Po22 VOLTAMPÉROMETRICKÁ CHARAKTERIZÁCIA N-HETEROCYKLOV A ICH KOMPLEXOV Miroslav Hunčák, Ladislav Rábara, Ján Mocák	151
1Po23 FLUORESCENČNÁ SPEKTROSKOPIA SUPRAMOLEKULOVÉHO SYSTÉMU KUMARÍN/β- CYKLODEXTRÍN/MICELA <u>E. Jáné</u> , M. Žitňan, O. Grančičova, V. Szócs, T. Pálszegi, I. Bugár, D. Lorenc, D. Velič	152
1Po24 VÝPOČET OBSAHŮ MAJORITNÍCH ORGANICKÝCH SLOUČENIN Z CHEMICKÉ ELEMENTÁRNÍ ANALÝZY <u>Zdeněk Klika</u> , Ivan Kolomazník.....	152

1Po25 SELF-ASSEMBLED MONOLAYERS OF METHYLATED BETA-CYCLODEXTRIN ON MERCURY AND GOLD ELECTRODES Viliam Kolivoška, Miroslav Gál, Magdaléna Hromadová, Michal Valášek, Lubomír Pospíšil, Štěpánka Lachmanová, Jana Bulíčková, Christina Loukou, Jean-Maurice Mallet.....	153
1Po26 ELEKTROKINETICKÝ POTENCIÁL NA POVRCHU PEVNÝCH LÁTEK <u>Zdeňka Kolská</u> , Václav Švorčík, Nikola Slepíčková Kasálková, Alena Řezníčková, Zuzana Makajová	153
1Po27 PROTOPIN A ALLOKRYPTOPIN: FLUORESCENČNÍ VLASTNOSTI A NMR ANALÝZA Martin Kubala, <u>Pavel Kosina</u> , Jan Vacek, Igor Popa, Marika Janovská, Jitka Ulrichová, Zdeněk Trávníček, a Vilím Šimánek	154
1Po28 HPLC DETERMINATION OF CHOSEN FLAVONOIDS IN HOP EXTRACT <u>Jarmila Kováčová</u> , Jozef Lehotay, Ján Mocák, Jozef Čižmárik.....	154
1Po29 UHLÍKOVÉ NANORÚRKY AKO MODIFIKÁTOR TUHEJ UHLÍKOVEJ ELEKTRÓDY <u>Zuzana Kováčová</u> , Lubomír Pikna.....	155
1Po30 KRITICKÉ POROVNÁNÍ KAPILÁRNÍ KAPALINOVÉ CHROMATOGRAFIE A KLASICKÉ VYSOKOÚČINNÉ KAPALINOVÉ CHROMATOGRAFIE VE SPOJENÍ S TANDEMOVOU HMOTNOSTNÍ DETEKCÍ PRO ANALÝZU ESTROGENNÍCH POLUTANTŮ VE VODNÉ MATRICI PO EXTRAKCI TUHOU FÁZÍ. <u>Kozlík Petr</u> , Bosáková Zuzana.....	155
1Po31 A HANGING MERCURY DROP ELECTRODE-BASED VOLTAMMETRIC DNA BIOSENSOR FOR THE DETECTION OF DNA DAMAGE CAUSED BY NITRATED POLYCYCLIC AROMATIC HYDROCARBONS <u>Zuzana Krejčová</u> , Vlastimil Vyskočil and Jiří Berek.....	156
1Po32 SEKVENČNÉ STANOVENIE ANIÓNOV A KATIÓNOV V PITNÝCH VODÁCH KAPILÁRNOU ZÓNOVOU ELEKTROFORÉZOU NA ČIPOCH <u>Pavol Kruk</u> , Milan Luc, Marián Masár	156
1Po33 STUDIUM KINETIKY β -N-ACETYLHEXOSAMINIDAS POMOCÍ KAPILÁRNÍ ELEKTROFORÉZY <u>Tomáš Křížek</u> , Pavel Coufal, Helena Ryšlavá, Veronika Doubnerová	157
1Po34 NOVÁ METODA POST-KOLONOVÉ DERIVATIZACE AMINOKYSELIN POMOCÍ „SOLID-PHASE“ REAKTORU <u>Anna Kubíčková</u> , Pavel Coufal.....	157
1Po35 ELEKTROCHEMICKÉ STUDIUM KATALYTICKÝCH VLASTNOSTÍ SYNTETICKÝCH METALOPROTEINŮ <u>Štěpánka Lachmanová</u> , Magdaléna Hromadová.....	158
1Po36 REDOX REACTIONS OF NOVEL PREPARED SELENADIAZOLOQUINOLONES STUDIED BY IN SITU UV-VIS-EPR SPECTROELECTROCHEMISTRY <u>Karol Lušpai</u> , Zuzana Barbieriková, Peter Rapta, Vlasta Brezová, Andrej Staško	158
1Po37 STANOVENÍ SACHARIDŮ V NÁPOJÍCH A POTRAVINÁCH POMOCÍ KAPILÁRNÍ ELEKTROFORÉZY S BEZKONTAKTNÍ VODIVOSTNÍ DETEKCÍ <u>Klára Málková</u> , Petr Tůma, Eva Samcová.....	159

1Po38 ON-LINE COUPLED ISOTACHOPHORESIS-CAPILLARY ZONE ELECTROPHORESIS SEPARATION AND FIBER BASED SPECTRAL PHOTOMETRIC DETECTION METHOD FOR HIGHLY RELIABLE AND SENSITIVE DETERMINATION OF QUININE IN BEVERAGES <u>Katarína Maráková</u> , Peter Mikuš, Juraj Piešťanský, Lucia Veizerová	160
1Po39 STUDIUM MOŽNOSTÍ DEKONTAMINACE ORGANICKÉ FÁZE VZNIKAJÍCÍ PŘI TODGA PROCESU <u>Kamil Vavřinec Mareš</u> , Jan John, Mojmír Němec.....	160
1Po40 STANOVENÍ KLINICKY VÝZNAMNÝCH LÁTEK METODOU HPLC <u>Jana Matějčková</u> , Martin Jaček, Eva Samcová	160
1Po41 ANALYTICKÉ ASPEKTY ON-LINE KOMBINÁCIE ZÓNOVÁ ELEKTROFORÉZA – ZÓNOVÁ ELEKTROFORÉZA NA ČIPE V ANALÝZE MNOHOZLOŽKOVÝCH ZMESÍ IÓNOGÉNNÝCH LÁTOK <u>Milan Luc</u> , Marián Masár	161
1Po42 EPR SPECTROSCOPY OF SOL-GEL REACTION MIXTURE DOPPED WITH TRANSITION METAL IONS Lucia Husáriková, <u>Milan Mazúr</u>	162
1Po43 POROVNÁNÍ UHLÍKOVÝCH PASTOVÝCH ELEKTROD VYROBENÝCH Z RŮZNĚ VELKÝCH MIKROKULIČEK SKELNÉHO UHLÍKU <u>Lenka Němcová</u> , Jiří Zima, Jiří Barek	162
1Po44 POLAROGRAPHIC AND VOLTAMMETRIC DETERMINATION OF FLUORODIFEN <u>Vít Novotný</u> , Etela Kouklíková, Jiří Barek.....	163
1Po45 VPLYV ZWITTERIONICKÝCH DETERGENTOV NA ZÓNOVO ELEKTROFORETICKÚ SEPARÁCIU HUMÍNOVÝCH KYSELÍN S IZOTACHOFRETICKOU PREDÚPRAVOU <u>Andrea Pastierová</u> , Róbert Bodor, Dušan Kaniansky	163
1Po46 HMOTNOSTNÁ SPEKTROMETRIA ROZKLADU CHOLESTEROLU NA POVRCHU FOTOKATALYZÁTORA TiO ₂ <u>Michal Procházka</u> , Monika Stupavská, Dušan Velič.....	164
1Po47 SPEKTROFOTOMETRIE A ELEKTROCHEMIE QUERCETINU V PŘIROZENÝCH PODMÍNKÁCH <u>Šárka Ramešová</u> , Romana Sokolová, Ján Žabka, Ilaria Degano	164
1Po48 THE COMPARISON OF TWO ANALYTICAL METHODS FOR DETERMINATION OF ETHOXYACETIC ACID IN HUMAN URINE OF ETHOXYETHANOL-EXPOSED PEOPLE <u>Lucie Rímnacova</u> , Petr Simek, Jaroslav Mraz, Ilona Sperlingova.....	165
1Po49 VOLTAMETRICKÉ A AMPEROMETRICKÉ STANOVENÍ 5-NITROCHINOLINU V PITNÉ A ŘÍČNÍ VODĚ POMOCÍ UHLÍKOVÉ FILMOVÉ ELEKTRODY <u>Tereza Rumlová</u> , Ivan Jiránek, Jiří Barek.....	165
1Po50 VYUŽITIE NIR SPEKTROSKOPIE K STANOVENIU STUPŇA ESTERIFIKÁCIE PEKTÍNŮV. <u>Vlasta Sasinková</u> , Anna Malovíková	166
1Po51 MATRIX RELATED ASPECTS OF TRYPTOPHAN ANALYSIS <u>M. Stupavska</u> , M. Jerigova, D. Velic	166

1Po52 PŘÍPRAVA A VYUŽITÍ NANOČÁSTIC ZNS A CDS PRO FOTODEGRADACI FENOLU VE VODNÝCH ROZTOCÍCH Petra Horíková, <u>Ladislav Svoboda</u> , Jakub Matys, Ondřej Kozák, Petr Praus.....	166
1Po53 PŘÍPRAVA NANOČÁSTIC STRĚBRA V SYSTÉMU VODA-ALKOHOL <u>Tomáš Svobodník</u> , Libor Kvítek, Aleš Panáček, Robert Pucek	167
1Po54 INFLUENCE OF METHACRYLIC ACID ADDITION ON THE SEPARATION PERFORMANCE OF POLYSTYRENE-BASED MONOLITH <u>Adéla Svobodová</u> , Jiří Vojta, Eva Tesařová , Pavel Coufal	167
1Po55 SORPCE KOVŮ NA UHLÍKATÝCH AEROGELECH DOPOVANÝCH KOVY <u>Vít Šebesta</u> , Václav Slovák,.....	168
1Po56 FS TIME-RESOLVED SPECTROSCOPY OF SOLID FILMS BASED ON OLIGOTHIOPHENE COPOLYMER. <u>J. Šepelák</u> , D. Velič, I. Bugár, G. Čík, D. Repovský	168
1Po57 DESTILACE SMĚSI MOF ₆ – UF ₆ <u>Jan Škarohlíd</u>	169
1Po58 BENZOTHAZOLOVÉ DERIVÁTY JAKO ÚČINNÉ INHIBITORY ACETYLCHOLINESTERÁZY <u>Šárka Štěpánková</u> , Aleš Imramovský, Markéta Kovářová	169
1Po59 DIAGNOSTIKA CHEMICKÝCH INDIKÁTOROV LEUKÉMIE NA POVRCHU MEMBRÁN POMOCO U HMOUOSTNEJ SPEKTROMETRIE SEKUNDRNÝCH IÓNOV <u>Katarína Švihlová</u> , Monika Stupavská, Tatiana Kurucová, Zdenka Sulová, Monika Jerigová, Dušan Velič.....	170
1Po60 VOLTAMMETRIC DETERMINATION OF CAFFEINE USING A BORON-DOPED DIAMOND ELECTRODE <u>Ľubomír Švorc</u> , Miroslav Rievaj, Peter Tomčík, Dušan Bustin	170
1Po61 FLUORESCENČNÁ SPEKTROSKOPIA SUPRAMOLEKULOVÝCH KOMPLEXOV KUMARÍNU C153 A CYKLODEXTRÍNOVÝCH DERIVÁTOV <u>Marianna Trenčanová</u> , Dušan Velič,.....	171
1Po62 EXPLODAT-DATABÁZE VOJENSKÝCH, CIVILNÍCH VÝBUŠNIN A CHEMICKÝCH LÁTEK POUŽITELNÝCH JAKO IMPROVIZOVANÉ VÝBUŠNINY prof. Ing. Karel Ventura, Csc., Martin Šoška, Bc., Libor Bohdanecký, Bc.....	171
1Po63 ŠTÚDIUM CHIRÁLNYCH HPLC SEPARÁCIÍ FEROELEKTRICKÝCH KVAPALNÝCH KRYŠTÁLOV A ICH PREKURZOROV <u>Terézia Vojtylová</u> , David Sýkora, Věra Hamplová	172
1Po64 HPLC STANOVENÍ NITROSLOUČENIN POMOCI PRŮTOKOVÉHO DETEKTORU ZE STRĚBRNÉHO PEVNÉHO AMALGÁMU <u>Oksana Yosypchuk</u> , Jiří Barek, Bogdan Yosypchuk	172
1Po65 APLIKACE EX SITU VOLTAMETRICKÝCH METOD PRO STUDIUM ANTIOXIDAČNÍCH A PROOXIDAČNÍCH VLASTNOSTÍ FLAVONOLIGNANŮ A ANALÝZU JEJICH INTERAKCÍ S DNA <u>Martina Zatloukalová</u> , Vladimír Křen, Radek Gažák, Martin Kubala, Jitka Ulrichová, Jan Vacek.....	173

- 1Po66 AMPÉROMETRICKÁ DETEKCE GENOTOXICKÝCH AMINODERIVÁTŮ
POLYCYKLICKÝCH AROMATICKÝCH UHLOVODÍKŮ V HPLC S VYUŽITÍM
PLATINOVÉHO MIKROCYLINDRICKÉHO DETEKTORU
Jaroslava Zavázalová, Hana Dejmková, Jiří Berek, Šárka Ramešová, Karolina Pecková..... 174
- 1Po67 ANALÝZA JÍLOVÝCH MINERÁLŮ S VYSOKÝM OBSAHEM STRĚBRA METODOU
RENTGENOVÉ FLUORESCENČNÍ SPEKTROMETRIE
Jana Zdrálková, Vladimír Tomášek..... 174
- 1Po68 ANALÝZA METABOLITOV VO VÝDYCHOVÝCH PLYNOCH ČLOVEKA S VYUŽITÍM
MIKROEXTRAKČNEJ TECHNIKY INCAT
Gabriela Addová, Peter Podolec, Alexandra Szabóová, Róbert Kubinec, Ivan Ostrovský, Jaroslav
Blaško, Renáta Górová, Ladislav Soják, Janka Kubincová, Jozef Višňovský, Anton Amann, Viktor
G. Berezkin 175
- 1Po69 ANALÝZA MONO- A DISACHARIDOV A ICH METABOLITOV V MOČI METÓDOU GC-MS
Gabriela Addová, Ivan Ostrovský, Róbert Kubinec, Jaroslav Blaško, Renáta Górová, Peter Podolec,
Jozef Višňovský, Alexandra Szabóová..... 175
- 1Po70 SEPARÁCIA A IDENTIFIKÁCIA MONONITRO- A DINITRO- IZOMÉROV N,N-
DIMETYLDIFENYLACETAMIDU
Jaroslav Blaško, Peter Podolec, Róbert Kubinec, Ivan Ostrovský, Gabriela Addová, Renáta
Górová, Ladislav Soják, Janka Kubincová, Jozef Višňovský, Alexandra Szabóová, Wilhelm
Lorenz 176
- 1Po71 STANOVENIE SUMY FTALÁTŮV A ICH METABOLITOV V TUKOVÝCH MATRICIACH
METÓDOU GC-FID
Jaroslav Blaško, Peter Podolec, Róbert Kubinec, Ivan Ostrovský, Gabriela Addová, Renáta
Górová, Ladislav Soják, Janka Kubincová, Jozef Višňovský, Alexandra Szabóová, Radomír
Čabala 176
- 1Po72 STANOVENIE SEVOFLURÁNU A METABOLITU HEXAFLUÓRIZOPROPANOLU
METÓDOU GC-TANDEM MS
Peter Podolec, Jaroslav Blaško, Gabriela Addová, Ivan Ostrovský, Róbert Kubinec, Alexandra
Szabóová, Jozef Višňovský, Anton Amann 177
- 1Po73 PRÍPRAVA TROJVRSTVOVÉHO ZARIADENIA INCAT VHODNÉHO NA ANALÝZU
METABOLITOV VO VÝDYCHU
Peter Podolec, Alexandra Szabóová, Róbert Kubinec, Jaroslav Blaško, Ivan Ostrovský, Gabriela
Addová, Renáta Górová, Jozef Višňovský, Viktor G. Berezkin..... 177
- 1Po74 SEPARACE A KONCENTROVÁNÍ URANU Z PŘÍRODNÍCH VOD NA TIO-PAN
A PRÍPRAVA VZORKŮ NA AMS
Irena Špendlíková, Jakub Raindl, Mojmír Němec, Ferdinand Šebesta, Alena Zavadilová, Jan John..... 178

Postery - sekcia 2 Anorganická a materiálová chémia 179

- 2Po01 THE USE OF A $\text{TiO}_2/\text{FeCl}_3$ MIXTURE IN ENVIRONMENTAL CLEANING TECHNOLOGY
Ewa Adamek, Wojciech Baran, Justyna Ziemiańska, Andrzej Makowski, Andrzej Sobczak..... 179
- 2Po02 VLIV ZPŮSOBU SYNTÉZY NA BAREVNOST PEROVSKITOVÝCH SLOUČENIN
Lucie Adolfová, Petra Šulcová, Žaneta Dohňalová, Lucie Vaverková..... 179

2Po03 ADSORPTION OF SURFACTANT ON THE ALUMINA PARTICLES IN THE PREPARATION OF CERAMIC FOAMS <u>Zora Bazelová</u> , Miroslav Jammický, Ladislav Pach, Ján Lokaj	180
2Po04 BIFUNKČNÍ LIGANDY DVOJMOCNÉ MĚDI <u>Jan Blahut</u> , Jan Kotek, Ivana Císařová	180
2Po05 STUDIUM PYROCHLOROVÝCH SLOUČENIN TYPU HO ₂ O ₃ – CEO ₂ – MOO ₃ <u>Lenka Bukovská</u> , Jana Hořejší, Petra Šulcová.....	180
2Po06 PRÍPRAVA MONODISPERZNÝCH NANOGULIČIEK SIO ₂ <u>Peter Čopan</u> , Dušan Galusek.....	181
2Po07 AMINOBISFOSFINÁTY – SYNTÉZA A KOORDINAČNÍ VLASTNOSTI <u>Tomáš David</u> , Vojtěch Kubíček, Jana Havlíčková, Ivan Lukeš.....	181
2Po08 CHARACTERIZATION OF COMPLEX OXIDES PREPARED BY BALL MILLING <u>M. Fabian</u> , S. Suzuki, K. Shinoda, B. Antic, A. Kremenovic, F. Saito, Q. Zhang, P. Baláž, S. Indris, V. Šepelák.....	182
2Po09 STRUCTURE AND CRYSTAL CHEMISTRY OF CA ₁₀ (CRVO ₄) ₆ (CRV IO ₄) Dalma Gyepesová and Vratislav Langer	182
2Po10 MEDZIMOLEKULOVÉ INTERAKCIE V KRYŠTÁLOVÝCH ŠTRUKTÚRACH DVOCH KOMPLEXNÝCH ZLÚČENÍN MEDI S HEXAFLUORIDOKREMIČITANOVÝM ANIÓNOM <u>Jaroslava Haníková</u> , Juraj Kuchár, Juraj Černák	183
2Po11 CYTOTOXICITA ALLYLOVÝCH A CYKLOPENTADIENYLOVÝCH KOMPLEXOV MOLYBDÉNU <u>Jan Honzíček</u> , Peter Boháčík, Jaromír Vinklár, Martina Řezáčová, Karolína Foltánová	183
2Po12 UHLÍKOVÉ VRSTVY A JEJICH ELEKTRICKÉ VLASTNOSTI <u>Tomáš Hubáček</u> , Marek Staszek, Václav Švorčík	184
2Po13 ADSORPČNÍ VLASTNOSTI ANTIMONU V POROVNÁNÍ S ARSENEM <u>Bohumila Jakubíková</u> , Barbora Doušová, Stanislava Krejčová.....	185
2Po14 INFLUENCE OF CLAY FILLERS ON PROPERTIES OF POLYMERIC MATERIALS <u>Zuzana Jankurová</u> , Marianna Pajtášová, Darina Ondrušová, Mária Kopcová.....	185
2Po15 PRÍPRAVA ARAGONITU Z DUSIČNANU VÁPENATÉHO <u>Jana Jurišová</u> , Ladislav Pach, Pavel Fellner, Jana Gabčová, Vladimír Danielik	185
2Po16 STUDIUM MECHANISMŮ IZOMERIZACÍ PLANÁRNÍCH SLOUČENIN PLATINY A PALLADIA <u>Aleš Kalup</u> , Michal Čajan, Zdeněk Trávníček.....	186
2Po17 NIOBOCENOVÉ SLOUČENINY SUBSTITUOVANÉ NA CYKLOPENTADIENYLOVÝCH KRUIČÍCH <u>Iva Klepalová</u> , Jan Hozíček, Milan Erben, Jaromír Vinklár	186
2Po18 THE COMPARISON OF ZEOLITE FILLER AND CARBON BLACK FILLER EFFICIENCY IN POLYMERIC MATERIALS <u>M. Kopcová</u> , D. Ondrušová, M. Pajtášová, M. Ďurčková, M. Čechová, Z. Jankurová, E. Jóna .	187

2Po19 VLIV VYBRANÝCH CHARAKTERISTIK PŮD NA JEJICH ADSORPČNÍ SCHOPNOSTI <u>Stanislava Krejčová</u> , Barbora Doušová, Bohumila Jakubíková.....	187
2Po20 FYZIKÁLNO-CHEMICKÁ ANALÝZA SYSTÉMU (FLINAK) _{EUT} -K ₂ ZRF ₆ <u>Blanka Kubíková</u> , Viliam Pavlík, Iveta Macková, Veronika Gurišová, Miroslav Boča.....	188
2Po21 NOVEL CU(II) COMPLEXES BASED ON SQUARE TETRACYANIDOMETALLATES <u>Juraj Kuchár</u> , Veronika Suchá, Juraj Černák	188
2Po22 DIELEKTRICKÉ VLASTNOSTI TEPLOTNĚ NAMÁHANÝCH TENKÝCH VRSTEV AU NA SKLE <u>Ondřej Kvítek</u> , Václav Švorčík.....	189
2Po23 REHYDRATAČE METAKAOLINU <u>Miloslav Lhotka</u> , Vladimír Machovič, Barbora Doušová, David Koloušek.....	189
2Po24 SUSPENZNÍ PŘÍPRAVA PIGMENTŮ TYPU BASN _{1-x} TB _x O _{3±Δ} <u>Petra Luňáková</u> , Jana Luxová, Miroslav Trojan	190
2Po25 CÍNIČITÉ PIGMENTY S LANTHANOIDY <u>Petra Luňáková</u> , Jakub Trojan, Miroslav Trojan, Jana Luxová	190
2Po26 INTERAKCE NANOČÁSTIC OXIDU TITANIČITÉHO S BIOLOGICKÝMI SYSTÉMY <u>Libor Mastný</u> , Zdeňka Kovářová.....	191
2Po27 PRÍRODNÉ A SYNTETICKÉ ŽELEZITÉ OXYHYDROXIDY Z KYSLÝCH BANSKÝCH VÝTOKOV <u>Branislav Máša</u> , Petra Pulišová, Eva Michalková, Ján Šubrt.....	191
2Po28 NOVÉ VRSTEVNATÉ FUNKCIONALIZOVANÉ FENYLFOFONÁTY TITANIČITÉ <u>Klára Melánová</u> , Ludvík Beneš, Jan Svoboda, Vítězslav Zima.....	191
2Po29 STUDIE REDOX OBLASTÍ V GERDIENOVĚ OBLOUKU <u>Linda Mišková</u> , Libor Mastný, Vlastimil Brožek	192
2Po30 INTRODUCTION OF NOVEL N,O-CHELATING LIGAND INTO THE TIN CHEMISTRY <u>Martin Novotný</u> , Aleš Růžička	192
2Po31 KORÓZIA ZLIATINY INCOLOY 800H/HT <u>Viliam Pavlík</u> , Ľubomír Koleda, Anna Jurová	193
2Po32 PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE MATERIÁLŮ V OXIDOVÉM SYSTÉMU M-BI-TA (M= CA, SR, BA), JAKOŽTO POTENCIÁLNÍCH BEZOLOVNATÝCH PIEZOELEKTRIK <u>Jiří Plocek</u> , Zdeněk Kváča, Václav Matz, Přemysl Vaněk	193
2Po33 PŘÍPRAVA NANO-STRUKTURNÍ PĚNY OXIDU TITANIČITÉHO <u>Petra Pulišová</u> , Eva Kleinová, Petr Svora, Jaroslav Boháček, Petr Bezdička, Monika Maříková, Jan Šubrt.....	194
2Po34 TRANSITION METAL COMPLEXES WITH 9-DEAZAHYPOXANTHINE <u>D. Rak</u> , Z. Trávníček	194

2Po35 SPEKTROSKOPICKÉ CHARAKTERISTIKY GEOPOLYMERŮ NA BÁZI GRANULOVANÉ VYSOKOPECNÍ STRUSKY A POPÍLKU, IDENTIFIKACE CSH FÁZE V TĚCHTO MATERIÁLECH <u>Lucie Ruppenthalová, Petr Martinec</u>	195
2Po36 AMINOMETHYLPHOSPHONATE COMPLEXING PROPERTIES TO ZN(II) IN AQUEOUS SOLUTION AND SOLID STATE Ingrida Rostášová ¹ , Zuzana Vargová ¹ , Róbert Gyepes ^{2,3} , Katarína Györyová ¹ , P. Hermann	195
2Po37 CHARAKTERIZACE POVRCHOVÝCH VLASTNOSTÍ VYBRANÝCH POLYMERŮ <u>Alena Řezníčková, Zdeňka Kolská, Václav Švorčík</u>	196
2Po38 DFT STUDY OF MONTMORILLONITE INTERCALATED WITH TMA ⁺ . <u>Eva Scholtzová, Daniel Tunega, Lubomír Benco, Helena Pálková</u>	196
2Po39 TEPLOTNÍ STABILITA AU NANOVRSTEV <u>Jakub Siegel, Robert Krajcar, Ondřej Kvítek, Václav Švorčík</u>	197
2Po40 INTERAKCE PLAZMATU S POVRCHEM POLYMERNÍCH SUBSTRÁTŮ <u>Petr Slepíčka, Eliška Stránská, Simona Trostová, Zdeňka Kolská, Nikola Slepíčková Kasálková, Petr Sajdl, Václav Švorčík,</u>	197
2Po41 KOVOVÉ NANOČÁSTICE NA PE PRO TKÁŇOVÉ INŽENÝRSTVÍ <u>Nikola Slepíčková Kasálková, Silvie Rimpelová, Petr Slepíčka, Lucie Bačáková, Václav Švorčík</u>	198
2Po42 ADSORPCE NANOČÁSTIC STRĚBRA NA UHLÍKATÝCH AEROGELECH <u>Petr Slovák, Libor Kvítek, Aleš Panáček, Robert Pucek, Václav Slovák</u>	198
2Po43 EPITAXNÍ RŮST GAN:MN VRSTEV METODOU MOVPE <u>Josef Stejskal, Zdeněk Sofer, David Sedmidubský, Filip Šaněk, Štěpán Huber, Miroslav Maryško, Jiří Hejtmánek, Karel Jurek, Martin Mikulics</u>	199
2Po44 ŠTŮDIUM ZLÚČENÍN KRYŠTALIZUJÍCÍCH ZO SÚSTAV CU ²⁺ –BAPED–[M(CN) ₄] ²⁻ (BAPED = N,N'-BIS(3-AMINOPROPYL)-1,2-DIAMINOETÁN, M = NI, PD) <u>Monika Stolárová, Juraj Černák, Erik Čížmár, Milagros Tomás, Larry R. Falvello</u>	199
2Po45 NANODRÁTY OXIDU CINIČITÉHO PŘIPRAVENÉ METODOU VLS <u>Filip Šaněk, Zdeněk Sofer, David Sedmidubský, Štěpán Huber, Martin Mikulics</u>	200
2Po46 SYNTÉZA, CHARAKTERIZACE A STUDIUM MAGNETO-STRUKTURNÍCH KORELACÍ TROJADERNÝCH KYANIDOKOMPLEXŮ A THIOKYANIDOKOMPLEXŮ VYBRANÝCH PŘECHODNÝCH KOVŮ <u>Tomáš Šilha, Ivan Nemeč, Radovan Herchel, Zdeněk Šindelář, Zdeněk Trávníček</u>	200
2Po47 STUDIUM POVRCHU POLYMERNÍHO SUBSTRÁTU <u>Simona Trostová, Zdeňka Kolská, Petr Slepíčka, Václav Švorčík</u>	201
2Po48 TENKÉ VRSTVY SYSTÉMU GE-GA-S S. Valková, T. Wágner, M. Bartoš, M. Pavlišta, J. Příkryl, M. Vlček, L. Beneš, B. Frumarová, M. Frumar.....	202
2Po49 ELEKTROKINETICKÝ POTENCIÁL RUTILOVÝCH PIGMENTŮ TYPU TI _{1-3x} CR _x M _{2x} O ₂ Jan Večeřa, Jan Čech, Petr Mikulášek, Petra Šulcová	202

2Po50 KOMPOZITNÍ MEMBRÁNA (POLYIMID - SILIKALIT-1): IDENTIFIKACE MIKROSTRUKTURY, VÝPOČET EFEKTIVNÍ DIFUZIVITY A PERMEABILITY <u>Martin Veselý</u> , Pavel Čapek, Vladimír Hejtmánek.....	203
2Po51 INTERKALACE TIMOPRAZOLU DO STRUKTURY PODVOJNÝCH VRSTEVNATÝCH HYDROXIDŮ <u>Zorica Zapivovarski Votipka*</u> , František Kovanda.....	203
2Po52 UHLÍKATÉ AEROGELY A JEJICH APLIKACE <u>Tomáš Zelenka</u> , Václav Slovák	204
Postery - sekcia 3 Organická chémia a polyméry 204	
3Po01 AKTIVITA PARAOXONÁZY A JEJ OVPLYVNENIE PODÁVANÍM FENOFIBRÁTU. Lucia Andrežalová ¹ , Katarína Šišková ² , Jana Muchová ¹ , Ingrid Pauliková ² , Zdeňka Ďuračková ²	204
3Po02 PŘÍPRAVA A APLIKACE VYSOCE FLUOROVANÝCH HOVEYDOVÝCH-GRUBBSOVÝCH KATALYZÁTORŮ <u>Mario Babuněk</u> , Vendula Kelbichová, Martin Schindler, Eva Vrbková, Jan Hošek, Markéta Rybáčková, Jaroslav Kvíčala	205
3Po03 SCAVENGING AND CHAIN-BREAKING ACTIVITY OF BUCILLAMINE ON FREE- RADICAL-MEDIATED DEGRADATION OF HIGH-MOLAR-MASS HYALURONAN <u>Mária Baňasová</u> , Katarína Valachová, Jozef Rychlý, Elena Priesolová, Milan Nagy, Ivo Juránek, Ladislav Šoltés	205
3Po04 DEVELOPMENT OF PHSCF ₂ CF ₂ SIME ₃ AS TETRAFLUOROETHYLENE RADICAL ANION EQUIVALENT. PREPARATION OF TETRAFLUOROETHYL SUBSTITUTED ALCOHOLS AND TETRAFLUORO-TETRAHYDRO-PYRANS <u>Petr Beier</u> , Yana Chernykh, Blanka Klepetářová.....	206
3Po05 VYUŽITÍ „PUSH-PULL“-POLARIZOVANÝCH ETHYLENŮ PRO SYNTÉZU SUBSTITUOVANÝCH 4-AMINO-1-ARYL-1H-PYRAZOL-5-KARBOXYLÁTŮ <u>Břetislav Brož</u> , Petr Šimůnek.....	206
3Po06 ŠTÚDIUM VZÁJOMNEJ PREMENEY SPIROINDOLÍN[3,5']TIAZOLÍNŮV A TIAZÍNŮ[6,5- B]INDOLŮV <u>Mariana Budovská</u> , Peter Kutschy, Martina Pilátová, Ján Mojžiš.....	207
3Po07 THIAMAKROCYKLY S CHIRÁLNÍMI KARBOXYLÁTOVÝMI STAVEBNÍMI BLOKY <u>Michal Buchta</u> , Petr Holý, Jiří Rybáček	208
3Po08 NMR STRUCTURAL STUDY OF INSTANT COFFEE ARABINOGALACTAN-PROTEIN OLIGOSACCHARIDES M. Matulová, <u>P. Capek</u> , J. Turjan, J. Kozák, S. Kaneko, L. Navarini, F. Suggi-Liverani	208
3Po09 SYNTÉZA ESTERŮ PORPHYRINU SE ŽLUČOVÝMI KYSELINAMI <u>Lenka Cardová</u> , Pavel Drašar	209
3Po10 SYNTÉZA FARMAKOFÓRNEHO LIGANDU URČENÉHO PRE VÝVOJ INHIBÍTORA TUMOROVEJ ANGIOGENÉZY S VEGFR-2 RECEPTOROVOU SELEKTIVITOU <u>Ľuboš Cehlárik</u> , Andrej Boháč	209

3Po11 FOTO-AKTÍVNE NANOKOMPOZITY NA BÁZE ELASTOMÉROV PLNENÝCH UHLÍKOVÝMI NANOTRUBIČKAMI <u>Klaudia Czaniková</u> , Markéta Ilčíková, Peter Kasák, Igor Krupa, Mária Omastová	209
3Po12 REDUKCE KYPOVÝCH BARVIV, VLIV TEPLoty, MÍRY ALKALITY A TENZIDŮ Michal Černý, Zdeňka Blechová, Ladislav Burgert.....	210
3Po13 KONJUGOVANÉ KVADRUPOLÁRNE DERIVÁTY KONDENZOVANÝCH TIAZOLOV <u>Alexandra Čibová</u> , Peter Magdolen, Pavol Zahradník.....	210
3Po14 SPECTRAL PROPERTIES OF CHALCONE CONTAINING TRIPHENYLAMINO STRUCTURAL UNIT IN SOLUTION AND IN POLYMER MATRICES. Martin <u>Danko</u> , Anita Andics, Csaba Kósa, Pavol Hrdlovič, Daniel Végh.....	211
3Po15 ASYMMETRIC INTRAMOLECULAR PD(II)-CATALYZED OXYCARBONYLATION OF UNSATURATED DIOLS <u>Jana Doháňošová</u> , Tibor Gracza, Angelika Lásiková, Giang Vo-Thanh, Martial Toffano.....	211
3Po16 HETEROCYKLIČKÉ ANALÓGY TAKRÍNU S VÝZNAMNOU ANTICHOLINESTERÁZOVOU AKTIVITOU <u>L. Drajna</u> , J. Imrich, S. Hamuľáková, P. Kristian	212
3Po17 MĚDNATÉ KOMPLEXY CHIRÁLNÍCH IMIDAZOLIN-5-ONŮ A IMIDAZOLIDIN-5-ONŮ JAKO ENANTIOSELEKTIVNÍ KATALYZÁTORY HENRYHO REAKCE <u>Pavel Drabina</u> , Illia Panov, Sergej Karel, Miloš Sedlák	212
3Po18 STEREODYNAMICS OF ATROPISOMERS OF 2,2'-BIS(ORTHO-SUBSTITUTED PHENYL)-1,1'-BINAPHTHYLS <u>Marcel Ehn</u> , Branislav Horváth, Martin Putala.....	213
3Po19 OXIDAČNÍ STABILITA POLYANILINU <u>M. Exnerová</u> , Z. Rozlívková, M. Trchová, J. Stejskal	214
3Po20 OČKOVANIE POLYPROPYLENU METAKRYLÁTMI V TUHEJ FÁZE <u>Agnesa Fiedlerová</u> , Štefan Chmela	214
3Po21 SYNTHESIS AND PHOTOPHYSICAL CHARACTERIZATION OF BINAPHTHALENE-COUMARINE DERIVATIVES <u>Juraj Filo</u> , Marek Cigáň, Martin Putala*.....	215
3Po22 STEREOSELEKTÍVNE TANDEMOVÉ MICHAELOVE/MANNICHOVE REAKCIE KATALYZOVANÉ KOMPLEXOM CU/TANIAPHOS <u>Zuzana Galeštoková</u> , Radovan Šebesta	215
3Po23 NOVEL TACRINE DERIVATIVES CHARACTERIZED BY HIGH POTENT INHIBITION OF ACETYLCHOLINESTERASE APPROPRIATE FOR TREATMENT OF ALZHEIMER'S DISEASE <u>Slávka Hamuľáková</u> , Ladislav Janovec, Kamil Kuča, Pavol Kristian, Mária Baňasová, Ján Imrich.....	216
3Po24 KOMPOZITNÍ MATERIÁLY NA BÁZI SYNTETICKÉHO HYDROGELU A BAKTERIÁLNÍ CELULÓZY <u>Radka Hobzová</u> , Miroslava Dušková-Smrčková, Zenya Karpushkin, Jiří Michálek, Paul Gatenholm.....	216

3Po25 VYUŽITIE FLUORESCENCIE PRE URČENIE ROZSAHU „ŽIVOSTI“ NITROXIDMI REGULO-VANEJ RADIKÁLOVEJ POLYMERIZÁCIE <u>Ľudmila Hrkčková</u> , Štefan Chmela, Jozef Kollár	217
3Po26 PREKURZORY POLYMERNÍCH NOSIČŮ LÉČIV PŘIPRAVENÉ ŘÍZENOU RADIKÁLOVOU RAFT POLYMERACÍ <u>Petr Chytil</u> , Tomáš Etrych, Karel Ulbrich.....	217
3Po27 KARBAMÁTY SALICYLANILIDŮ JAKO INHIBITORY ACETYLCHOLINESTERÁZY A JEJICH MOLEKULÁRNÍ DOCKING <u>Aleš Imramovský</u> , Šárka Štěpánková, Juana Monreal Ferriz, Jarmila Vinšová, Ján Vančo, Josef Jampílek	218
3Po28 IZOTERMICKÁ KRYŠTALIZÁCIA PCL/MMT KOMPOZITOV <u>Ivica Janigová</u> , Daniela Johec-Mošková, Ivan Chodák	219
3Po29 SYNTHESIS, DNA BINDING, AND MOLECULAR MODELING OF CYTOTOXIC 3,6- BIS(IMIDAZOLIDINONE) ACRIDINES <u>Ladislav Janovec</u> , Mária Kožurková, Danica Sabolová, Ján Ungvarský, Helena Paulíková, Jana Pišíková, Zuzana Vantová, Pavol Kristian, Ján Imrich.....	219
3Po30 RECEPTORY KOVOVÝCH KATIONTŮ ODVOZENÉ OD ESTRONU, MESTRANOLU A KYSELINY CHOLOVÉ <u>Michal Jurášek</u> , Hanka Dvořáková, David Sedlák, Pavel Drašar* a Zdeněk Wimmer	220
3Po31 SVETLOM IMOBILIZOVANÝ ZWITTERIÓNOVÝ POLYMÉR <u>Peter Kasák</u> ,* Patrik Sobolčiak, Dušan Chorvát, Jr., Monika Lahová, Igor Lacík	220
3Po32 FLUOROVANÉ HOVEYDOVY-GRUBBSOVY KATALYZÁTORY A JEJCH VLIV NA METATEZI ALKENŮ <u>Vendula Kelbichová</u> , Mario Babuněk, Martin Schindler, Markéta Rybáčková, Jaroslav Kvíčala	221
3Po33 SYNTHESIS OF TRIARYLAMINE PRECURSORS FOR OPTOELECTRONIC MATERIALS <u>Lukáš Kerner</u> , Martin Putala.....	221
3Po34 STUDY OF PHYSICO-CHEMICAL AND BIOLOGICAL PROPERTIES OF ZINC(II) 2- CHLORO-BENZOATE COMPLEXES Lenka Findoráková, <u>Jana Kovářová</u> , Katarína Györyová, Daniela Hudecová, Dagmar Mudroňová,	222
3Po35 OPTIMALIZÁCIA POLYMÉRNÝCH MIKROKAPSÚL PRE IMUNITNÚ OCHRANU TRANSPLANTOVANÝCH LANGERHANSOVÝCH OSTROVČEKOV <u>Gabriela Kolláriková</u> , Peter Kasák, Dušana Mocinecová, Anne Mari Rokstad, Terje Espevik, Igor Lacík	222
3Po36 DONOR - ACCEPTOR ORGANIC SEMICONDUCTORS BASED ON DERIVATIVES OF DI(2- THIENYL)TETRAZINE AND DI(2-THIENYL)THIADIAZOLE E. Kurach, <u>K. Kotwica</u> , J. Rimarčík, V. Lukeš, D. Djurado, M. Zagorska, A. Pron	223
3Po37 DERIVÁTY 2-METHOXYBENZANILIDU A JEHO THIOXOANALOGU AKO ANTIMYKOBAKTERIÁLNE LÁTKY <u>Ján Kozic</u> , Jarmila Vinšová, Jiřina Stolaříková	223

3Po38 KORELÁCIE MEDZI ELEKTRICKÝMI A MECHANICKÝMI VLASTNOSTAMI ELASTOMÉRU PLNENÉHO VODIVÝM PLNIVOM <u>Juraj Krajčí</u> , Ivan Chodák	224
3Po39 NOVÉ DERIVÁTY SULFONAMIDŮ S 5-CHLOROSALICYLALDEHYDEM A KYSELINOU 5-CHLOROSALICYLOVOU <u>Martin Krátký</u> , Jarmila Vinšová, Vladimír Buchta, Jiřina Stolaříková.....	224
3Po40 VÝVOJ NOVÝCH REAKTIVÁTORŮ ACETYLCHOLINESTERÁZY - ANTIDOT PRO PŘÍPAD OTRAV ORGANOFOSFOROVÝMI PESTICIDY Kamil Kuča, Kamil Musílek, Daniel Jun, Miroslav Pohanka, Jana Zdarová-Karasová, Ondřej Soukup, Jan Marek, Jan Korabecny, Martina Hrabínová, Jiří Kassa	225
3Po41 INJEKČNĚ APLIKOVATELNÉ POLYMERY PRO LOKÁLNÍ RADIOTERAPII NÁDORŮ <u>Jan Kučka</u> , Martin Hrubý, Pavla Poučková, Marie Zadinová, Ondřej Lebeda	225
3Po42 BIOISOSTERE OF ROSCOVITINE, AN ANTICANCER DRUG IN CLINICAL TRIALS <u>Vladimír Kryštof</u> , Radek Jorda, Libor Havlíček	226
3Po43 HYDROGÉLY NA BÁZE 2-OXAZOLÍNŮV <u>Jozef Lustoň</u> , Juraj Kronek, Angela Kleinová, Marcel Mikulec, Veronika Mártonová	226
3Po44 POUŽITÍ IMOBILIZOVANÉHO PYRIDINIUM NITRÁTU JAKO KATALYZÁTORU PRO ŠTĚPENÍ β -PINENOXIDU NA PERILLOVÝ ALKOHOL <u>Ivana Luštická</u> , Lucie Abelová, Eliška Vyskočilová-Leitmannová a Libor Červený	227
3Po45 ZNAČENÍ STEROIDNÍHO SKELETU ISOTOPY VODÍKU <u>Aleš Marek</u> , Mahadeo R. Patil, Tomáš Elbert	227
3Po46 DEVELOPMENT OF NOVEL QUATERNARY DETERGENTS AS PART OF DECONTAMINATION AND DISINFECTION MEANS <u>J. Marek</u> , J. Korabecny., K. Musilek, J. Cabal, K. Kuca	228
3Po47 PD ^{II} CATALYZED LIQUID-PHASE OXYCARBONYLATION OF UNSATURATED POLYOLS AND AMINOALCOHOLS <u>Martin Markovič</u> , Matej Babjak, Tibor Gracza	228
3Po48 MIGRACE ZMĚKČOVADEL Z POLYVINYLCHLORIDU Hana Minaříková, Renáta Slavětínská, <u>Libor Mastný</u> , Radka Kalousková	229
3Po49 BICYCLIC ISOXAZOLIDINES AS BUILDING BLOCKS FOR THE PREPARATION OF THE BICYCLIC ISOXAZOLIDINYL NUCLEOSIDES <u>Michal Medvecký</u> , Ľubor Fišera, Ján Moncol'	229
3Po50 PRÍPRAVA A KATIÓNOVÁ POLYMERIZÁCIA 4,5-DIHYDROOXAZOLOV S NENASÝTENOU VÄZBOU <u>Marcel Mikulec</u> , Juraj Kronek, Jozef Lustoň, Agnieszka Kowalczyk	230
3Po51 ŠTÚDIUM POVRCHU POLYMÉRNÝCH MIKROKAPSÚL NA ENKAPSULÁCIU PANKREATICKÝCH OSTROVČEKOV V LIEČBE CUKROVKY TYPU I <u>Dušana Mocinecová</u> , Dušan Chorvát Jr., Igor Lacík	230
3Po52 SYNTHESIS OF NEW POTENTIAL CONSTRAINED CERAMIDE ANALOGS <u>Daniela Moravčíková</u> , Dušan Berkeš	231

3Po53 PRÍPRAVA A VLASTNOSTI KOMPOZITOV RECYKLOVANÉHO POLYETYLÉNU S DREVNOU MÚČKOU Z DATĽOVEJ PALMY <u>Zuzana Nógellová</u> , Igor Krupa, Mariam A. Al-Maadeed, Nabil Kassem Madi	231
3Po54 STEROIDNÍ DERIVÁTY-PŘÍPRAVA A FYZIKÁLNÍ VLASTNOSTI <u>Zdena Nováková</u> , Erkki Kolehmainen, Pavel Drašar	232
3Po55 REAKCIE 1-METOXYSPIROINDOL[3,5']TIAZOLÍN-1-IUMBROMIDU S GRIGNARDOVÝMI ČINIDLAMI <u>Peter Očenáš</u> , Lucia Tomášová, Peter Kutschy, Ján Mojžiš, Martina Pilátová	232
3Po56 STUDIUM INTRAMOLEKULÁRNÍCH VODÍKOÝCH MŮSTKŮ U ANTIMYKOBAKTERIÁLNĚ AKTIVNÍCH SALICYLAMIDŮ POMOCÍ SPEKTRÁLNÍCH A VÝPOČETNÍCH METOD <u>Karel Palát</u> , Eva Novotná, Karel Waisser	233
3Po57 ALKOXYPHENYLIMIDAZOLINES/IMIDAZOLES AS CHOLINESTERASES INHIBITORS – SYNTHESIS AND DETERMINATION OF INDEX PI ₅₀ <u>Patrik Pařík</u> , Šárka Štěpánková.....	233
3Po58 CÍLENÁ SYNTÉZA DERIVÁTŮ PŘESMYKU ESTERŮ SALICYLANILIDŮ <u>Karel Pauk</u> , Aleš Imramovský, Jiří Hanusek , Vladimír Pejchal	234
3Po59 1-[(1R)-1-(6-FLUOR-1,3-BENZTHIAZOL-2-YL)ETHYL]-3-SUBSTITUOVANÉ FENYL MOČOVINY JAKO INHIBITORY ACETYLCHOLINESTERÁZY <u>Vladimír Pejchal</u> , Šárka Štěpánková.....	234
3Po60 STABILIZERS BOUND COVALENTLY ON CHAINS OF MODEL POLYURETHANES: COLOR STABILITY <u>Jiří Podešva</u> , Tereza Titěrová, Vladimír Špaček, Luboš Prokůpek, Jana Kovářová.....	235
3Po61 SYNTHESIS OF 1,2,3-TRIAZOLO-LINKED OCTYL (1→6)-α-D-OLIGOMANNOSIDES AND THEIR EVALUATION IN MYCOBACTERIAL MANNOSYLTRANSFERASE ASSAY <u>Monika Poláková</u> , Martina Beláňová, Katarína Mikušová, Erika Lattová, Hélène Perreault.....	235
3Po62 PŘÍPRAVA A REAKČNÍ SCHOPNOST 5-THIOFENYL-1,2,4-DITHIAZOL-3-ONU <u>Oleksandr Ponomarov</u> , Jiří Hanusek.....	236
3Po63 KONSTANTY ACIDITY A MS CHARAKTERIZACE VYBRANÝCH 1-SUBSTITUOVANÝCH PIPERAZINŮ <u>Markéta Procházková</u> , Dana Němečková, Barbora Andělová, Josef Havel, Pavel Pazdera.....	236
3Po64 SYNTÉZA A VLASTNOSTI CHIRÁLNÍCH 2,2-DIMETHYL-1,3-DIOXOLAN-4,5- DIKARBOHYDRAZIDŮ ALKYLOVANÝCH NA DUŠÍKU <u>Oldřich Pytela</u> , Jana Kousalová	236
3Po65 POLYMERS FROM RENEWABLE MONOMERS BASED ON BUTYROLACTONE DERIVATIVES <u>M. Sabolová</u> , M. Danko, J. Mosnáček	237
3Po66 SYNTÉZA 13,14-EPOXYTRAVOPROSTU <u>Michal Sedlák</u> , Ivan Veselý	237

3Po67 KOMPATIBILITY SMĚSÍ CANDESARTANU CILEXETILU A CYKLODEXTRINU <u>Lenka Seilerová, Lukáš Krejčík, Bohumil Kratochvíl, Hana Brusová</u>	238
3Po68 STANOVENÍ OBSAHU POLYBUTADIENU V HOUŽEVNATÉM POLYSTYRENU METODOU INFRAČERVENÉ SPEKTROMETRIE <u>Michael Schwarze</u>	238
3Po69 ASSESSMENT OF PROPAGATION RATE COEFFICIENT, K_p , OF FREE-RADICAL POLYMERIZATION OF SULFOBETAINE AND PHOSPHOBETAINE METHACRYLIC MONOMERS <u>Patrik Sobolčiak, Marek Stach, Peter Kasák, * Dušan Chorvát, Jr., Igor Lacík*</u>	239
3Po70 SMALL QUATERNARY ACHE INHIBITORS FOR MG TREATMENT – SYNTHESIS, IN VITRO SCREENING AND MOLECULAR MODELLING STUDIES <u>Ondrej Soukup, Kamil Musilek, Marketa Komloova, Ondrej Holas, Anna Horova, Kamil Kuca</u>	239
3Po71 REDUCTION OF BIOFOULING ON ELECTROCONDUCTING SURFACES <u>M. Stach, Z. Kroneková, P. Kasák, J. Kollár, M. Pentrák, M. Mičušík, D. Chorvát Jr., T.S. Nunney I. Lacík</u>	240
3Po72 MOLEKULÁRNÍ MORFING – NOVÁ METODA PRO PROCHÁZENÍ CHEMICKÝM PROSTOREM <u>Daniel Svozil, David Hoksza</u>	240
3Po73 PŘÍPRAVA A VLASTNOSTÍ HYDROFOBNÍCH SORBENTŮ NA ZÁKLADĚ POLYSACHARIDŮ Jan Tůma, <u>Andriy Synytsya, Milan Marounek, Jana Čopíková</u>	241
3Po74 STEREOSELECTIVE SYNTHESIS OF NOVEL ALKYLINDOLIZIDINEDIOLS FROM GLUTAMIC ACID <u>Štefan Marchalín, Peter Šafář and Jozefína Žúžiová</u>	241
3Po75 PŘÍPRAVA CYKLOHEXANKARBONITRILU - SROVNÁNÍ VÍCEKROKOVÉ A „ONE-POT“ SYNTÉZY POMOCÍ NÁSTROJŮ ZELENÉ CHEMIE <u>Richard Ševčík, Jan Šimbera, Pavel Pazdera</u>	242
3Po76 INDEN A JEHO VYUŽITÍ PŘI PŘÍPRAVĚ CHEMICKÝCH SPECIALIT <u>Martina Štekrová, Eliška Vyskočilová, Libor Červený</u>	242
3Po77 MAKROCYKLICKÁ SLOUČENINA BAMBUS[6]JURIL - SYNTÉZA A SUPRAMOLEKULÁRNÍ CHEMIE <u>Jan Švec, Vladimír Šindelář*</u>	243
3Po78 PREPARATION OF PYRAZOLE SYSTEMS FROM ACTIVATED ENOLETHERS <u>Denisa Tarabová, Viktor Milata</u>	243
3Po79 ORGANOKATALYTICKÉ REAKCIE S VYUŽITÍM SOMO AKTIVÁCIE <u>Pavol Tisovský, Mária Mečiarová, Radovan Šebesta</u>	244
3Po80 AN EFFICIENT, RAPID TRIFLUOROACETYLATION OF ACTIVATED THIOPHENE AND PYRROLE DERIVATIVES. <u>Peter Tisovský, Anita Andicsová, Jozef Kožíšek, Marek Fronc, Daniel Végh</u>	244

3Po81 REAKCE FTALALDEHYDU S DUSÍKATÝMI NUKLEOFILY <u>Jiří Urban</u> , Jiří Ludvík, Jiří Klíma, Ludmila Šimková, Alan Liška.....	245
3Po82 TEPELNĚ ODOLNÉ POLYMERY PRO IDENTIFIKAČNÍ TĚLÍSKA VÝBUŠIN <u>Miroslav Večeřa</u> , Luboš Prokůpek, Miroslav Štancel	245
3Po83 PŘÍPRAVA POLYAROMATICKÝCH DENDRIMERŮ NA BÁZI APIGENINU <u>Petr Vinš</u> , Fernando Cossío, Pavel Drašar	245
3Po84 DERIVÁTY AKRIDÍNU AKO INTERKALÁTORY DNA KVADRUPLEXU <u>Mária Vojtičková</u> , Ladislav Janovec, Ján Imrich.....	246
3Po85 VYSOKOMOLEKULÁRNÍ POLYMERNÍ SYSTÉMY VYUŽITELNÉ PŘI LÉČBĚ A DIAGNOSTICE PEVNÝCH NÁDORŮ L. Vystrčilová, T. Etrych, S. Hoffmann, K. Mäder, K. Ulbrich.....	246
3Po86 IMOBILIZOVANÉ METHYLTRIOXORHENIUM PRO METATÉZNÍ REAKCE <u>Radka Zdeňková</u> , Eliška Vyskočilová - Leitmannová, Libor Červený.....	247
3Po87 INOVACE ZPŮSOBU VÝROBY DIHYDROISOJASMONÁTU <u>Karel Zelinka</u> , Radim Ščigel, Jan Šimbera, Pavel Pazdera.....	247
3Po88 DIASTEREOSELECTIVE REDUCTIVE DESULFURIZATION OF BENZOTHIENOINDOLIZINES <u>Jozefína Žúžiová</u> , Peter Šafář and Štefan Marchalín	248
3Po89 SYNTHESIS AND OPTICAL PROPERTIES OF NOVEL <i>BIS</i> -(INDOLE-4-)PORPHYRIN NICKEL COMPLEXES <u>Marek Weclawski</u> , Daniel Gryko, Mariusz Tasior	248
3Po90 METHOD OF PREPARATION AND SPECTRAL CHARACTERIZATION OF N- SUBSTITUTED AMINO ACID DERIVATIVES <u>Atanas Chapkanov</u> , Tatiana Dzimbova, Bojidarka Ivanova	249
3Po91 AMINOHYDROXYLATIONS OF DIVINYLCARBINOL. FORMAL SYNTHESIS OF JASPINE B.	
3Po92 PALLADIUM CATALYSED SYNTHESIS OF BICYCLIC ETHERS <u>M. Palík</u> , T. Gracza.....	250
3Po93 ISOLATION PROCESS OF POLYPHENOLIC-POLYSACCHARIDE PREPARATION FROM <i>FRAGARIA VESCA</i> (L.) WITH THE ANTICOAGULANT ACTIVITY ON HUMAN BLOOD PLASMA I. Pawlaczyk, O. Lisowska, <u>J. Turjan</u> , J. Kozák, P. Capek, R. Gancarz	250
Postery - sekcia 4 Vyučovanie a história chémie 251	
4Po01 IMPLEMENTACE STUDIJNÍHO PROGRAMU „EUROPEAN MASTER IN MEMBRANE ENGINEERING“ NA VŠCHT PRAHA Karel Bouzek, Vlastimil Fíla, Ivona Sedlářová, Jana Jiroušová.....	251
4Po02 GEOMETRICKÉ PARAMETRY A KONFORMACE V DNA <u>Petr Čech</u> , Daniel Svozil, Filip Lankaš	251

4Po03 NOVÁ GENERACE ELEKTRONICKÝCH SLOVNÍKŮ <u>Petr Čech</u> , Miroslav Šimek, Jiří Znamenáček.....	252
4Po04 PHYSICAL CHEMISTRY – ENGLISH LABORATORY TEACHING Jan Hrbáč, <u>Martina Bancířová</u> ,	252
4Po05 POSSIBILITIES OF DIFFUSE REFLECTANCE SPECTRA EMPLOYMENT FOR SOLID MATERIALS - NEW LABORATORY EXERCISE (MOŽNOSTI VYUŽITÍ DIFUSNĚ REFLEKTANČNÍCH SPEKTER PEVNÝCH MATERIÁLŮ - NOVÁ LABORATORNÍ ÚLOHA) <u>Peter Priezel</u> , Libor Čapek, Šárka Botková.....	252
4Po06 INOVACE PROFESNÍ PŘÍPRAVY BUDOUCÍCH UČITELŮ CHEMIE <u>Marta Klečková</u> , Josef Husárek,, Jana Prášilová	253
4Po07 PROJEKT INCHIZIP NA UNIVERZITĚ PARDUBICE <u>Jiří Palarčík</u> , Miloslav Slezák	253

Postery - sekcia 5 Potravinárstvo, životné prostredie a biotechnológia.....	254
----------------------------------------------------------------------------------------	------------

5Po01 THE ASSESSMENT OF SUSCEPTIBILITY OF SULFONAMIDE DRUGS TO BIODEGRADATION IN ENVIRONMENTAL SAMPLES <u>Wojciech Baran</u> , Ewa Adamek, Justyna Ziemiańska, Andrzej Makowski, Andrzej Sobczak.....	254
5Po02 2,2,2-TRIFLUOROETHYL A-D-GALACTOPYRANOSIDE: NEW SUBSTRATE FOR ENZYME CATALYZED TRANSGLYCOSYLATIONS. <u>Miroslav Belák</u> , Jana Dudíková, Mária Mastihubová, Vladimír Mastihuba.....	255
5Po03 ODSTRAŇOVÁNÍ MĚDI (II) POMOCÍ OXYHUMOLITU Z ODPADNÍCH VOD OBSAHUJÍCÍCH FOSFÁTY <u>Hana Kohutová</u> , Bruno Kostura, Juraj Leško	255
5Po04 OXIDATION OF FAT COMPONENT OF FOOD DURING MICROWAVE HEATING <u>Ivana Kolesárová</u> , Stanislav Sekretár, Štefan Schmidt, Jarmila Hlánsniková, Lenka Vrbíková	255
5Po05 EMULZNÍ ENKAPSULACE PROBIOTICKÝCH MIKROORGANISMŮ <u>Ivana Lisová</u> , Šárka Horáčková, Milada Plocková	256
5Po06 HPLC STUDY AND PROTEINASE INHIBITION ACTIVITIES OF HOPE AND HOPE COMPONENTS. Tibor Maliar, Mária Maliarová, Jana Girmanová, Vladimír Fázik	256
5Po07 ISOLACE KOLAGENNÍCH PRODUKTŮ Z HOVĚZÍCH ŠLACH <u>Pavel Mokrejš</u> , Dagmar Janáčková, Vladimír Vašek.....	257
5Po08 FYTOTOXICITA BANSKÝCH VÔD A ZMESÍ KOVOV PO REMEDIÁCIÍ VLÁKNITÝMI MIKROSKOPICKÝMI HUBAMI <i>ASPERGILLUS NIGER</i> <u>Marianna Molnářová</u> , Ľubica Janovová, Alexandra Šimonovičová, Agáta Fargašová	257
5Po09 STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF DOC FROM FLÁJE DAM TRIBUTARY <u>František Novák</u> , Martina Šestauberová, Richard Hrabal, Jana Špirochová, Miroslav Krtička	258

5Po10 SORPTION OPTIMIZATION OF SENSORIC ACTIVE COMPOUNDS FROM FLAX SEED OIL Daniela Chmelová, <u>Miroslav Ondrejovič</u> , Tibor Maliar.....	258
5Po11 ČIŠTĚNÍ ODPADNÍCH VOD Z VÝROBY NITROGLYCERINU <u>Jiří Palarčík</u> , Vítězslav Šimon.....	258
5Po12 MATEMATICKÉ MODELOVÁNÍ HAVARIJNÍHO ÚNIKU AMONIAKU <u>Pavel Platoš</u> , Stanislav Bartusek, Petr Praus.....	259
5Po13 ODSTRAŇOVÁNÍ HALOGENIDŮ Z GENERÁTOROVÉHO PLYNU VZNIKLÉHO ZPLYŇOVÁNÍM BIOMASY Gabriela Cabáková, Michal Jeremiáš, <u>Michael Pohořelý</u>	259
5Po14 REACTIONS OF HYDROLYTIC ENZYMES IMMOBILIZED ON MAGNETITE-CHITOSAN PARTICLES <u>Kristyna Pospiskova</u> , Ludmila Zajoncova, Ivo Safarik, Katerina Polakova, Petr Tarkowski, Radek Zboril, Marek Sebela.....	260
5Po15 IMUNOCHROMATOGRAFICKÁ DETEKCE RODU <i>LISTERIA</i> A <i>CRONOBACTER</i> Barbora Javůrková, Martina Blažková, Barbora Haňková, Ladislav Fukal, <u>Pavel Rauch</u>	260
5Po16 PROTEKTIVNÍ VLIV EXTRAKTU Vinoserae NA POŠKOZENÍ DNA <u>Zuzana Rybková</u> , Kateřina Malachová.....	261
5Po17 CHARAKTERISTIKA LAKTOBACILŮ IZOLOVANÝCH Z TRÁVICÍHO TRAKTU <u>Pavla Sedláčková</u> , Šárka Horáčková, Milada Plocková.....	261
5Po18 MOŽNOSTI VYUŽITÍ BIOMASY Z FYTOEXTRAKCE TĚŽKÝCH KOVŮ <u>Michal Šyc</u> , Michael Pohořelý, Michal Jeremiáš, Petra Kameníková, Karel Svoboda, Miroslav Punčochář.....	262
5Po19 PŘÍPRAVA KOMOZITNÍCH SORBENTŮ NA BÁZI HYDRATOVANÉHO OXIDU ŽELEZITÉHO <u>Alena Uzlová</u> , Helena Parschová, Luděk Jelínek.....	262
5Po20 HYDRODEBROMACE 2,4,6-TRIBROMFENOLU PŮSOBENÍM KOVOVÝCH SLITIN <u>Tomáš Weidlich</u> , Lubomír Prokeš.....	263

Postery - sekcia 6 CHEMPROGRESS..... 264

6Po01 VLIV DOPOVÁNÍ MEMBRÁNY POLYBENZIMIDAZOLOVÉHO TYPU KYSELINOU FOSFOREČNOU NA CHARAKTERISTIKY VYSOKOTEPLTNÍHO MEMBRÁNOVÉHO PALIVOVÉHO ČLÁNKU <u>Marek Doležel</u> , Petr Mazúr, Martin Paidar, Karel Bouzek.....	264
6Po02 ŘÍZENÉ UVOLŇOVÁNÍ KOFEINU Z HYDROFILNĚ-LIPOFILNÍCH MATRIC NA BÁZI OXYCELULOSY <u>Jan Gajdziok</u> , Barbora Vraníková, David Vetchý, Hana Landová, Martina Bajerová, Kateřina Dvořáčková, Jan Muselík, Jakub Vysloužil.....	264
6Po03 DETERMINATION OF DIFFUSION COEFFICIENTS BY DIGITAL PROCESSING OF SORPTION EXPERIMENTAL DATA <u>Vladimír Hanta</u> , Jaroslav Poživil, Karel Friess, Ondřej Vopička, Vladimír Hynek, Miroslav Zgažar , Milan Šípek.....	265

6Po04 VLIV PŘIROZENÉHO KOLÍSÁNÍ KONCENTRACE KATIONTŮ VE DŘEVĚ NA VÝTĚŽEK THERMOLÝZNÍHO BIOOLEJE <u>Zdeněk Krpelík</u> , Ladislav Kurc, Libor Červený	265
6Po05 VLIV OBSAHU PLASTIFIKÁTORU NA PŘÍPRAVU A VLASTNOSTI MUKOADHEZIVNÍCH FILMŮ Z OXYCELULOSY <u>Hana Landová</u> , Jan Gajdziok, David Vetchý, Martina Bajerová, Kateřina Dvořáčková, Jan Muselík, Jakub Vysloužil.....	266
6Po06 NOSIČE ANODICKÉHO KATALYZÁTORU PRO ELEKTROLÝZU VODY TYPU PEM <u>Petr Mazúr</u> , Jan Vít, Martin Paidar, Karel Bouzek	266
6Po07 ŘEŠENÍ OBSAHOVÉ STEJNOMĚRSTI SMĚSÍ S OBSAHEM LÉČIVA S ÚZKÝM TERAPEUTICKÝM INDEXEM PRO PŘÍMÉ LISOVÁNÍ Aleš Franc, <u>Jan Muselík</u> , Jana Kvapilová, Radka Máslová	267
6Po08 CHARAKTERISTIKA PEVNÝCH VÁPENATÝCH CHEMOSORBENTŮ PRO ZACHYCOVÁNÍ SULFANU Jan David, <u>Ivona Sedlářová</u> , Jan Vídenský	267
6Po09 STUDIUM VLASTNOSTÍ MĚDĚNÉHO NOSIČOVÉHO KATALYZÁTORU PRO SELEKTIVNÍ HYDROGENACI FURFURALU NA FURFURYLALKOHOL <u>Daniela Strejcová</u> , Bohumír Dvořák, Gabriel Tóth	268
6Po10 PŘÍPRAVA MIKROČÁSTIC S OBSAHEM TRAMADOL-HYDROCHLORIDUMETODOU ODPAŘENÍ ROZPOUŠTĚDLAZ DVOJITÉ EMULZE V/O/V Jakub Vysloužil, Kateřina Dvořáčková, Martina Bajerová.....	268
6Po11 PROPERTIES OF POST- PROCESSED RUO ₂ /TIO ₂ STRUCTURES ANALYSED BY SIMS <u>Andrej Vincze</u> , Boris Hudec, Karol Fröhlich, Miroslav Michalka	269

Autorský index	269
-----------------------------	------------

Program prednášok	281
--------------------------------	------------

PLENÁRNA PREDNÁŠKA

BEYOND 2011- HOW TO MAKE IYC A LONG-LASTING SUCCESS?

Nicole J. Moreau

President of IUPAC

Thanks to its nature as a non-governmental, international, scientific organisation maintaining official relations with UNESCO, IUPAC had the capacity of asking UN an international year of Chemistry. With the help of several countries, this ask was successful, and in December 2008, the 63rd General Assembly of the United Nations adopted a resolution proclaiming 2011 as the International Year of Chemistry (IYC 2011).

Why ask for a IYC? Because in most countries, the image of Chemistry is very dubious. Therefore, it is very important to successfully set a conversation between Chemistry and Society and all stakeholders about the future shape of chemistry for sustainability set in the context of chemistry's achievements. The purpose is not to defend Chemistry, but to explain what it is really. We will also encourage an interest in Chemistry among young people and celebrate the contribution of women to chemistry, since 2011 will be the 100th anniversary of Marie Curie's Nobel Prize of Chemistry.

IUPAC and UNESCO organized only a small number of cornerstone events and activities and most activities are focused nationally and open to all. A look at the official website www.chemistry2011.org shows that many countries are very eager to organize their national year of chemistry. If we do not want that chemistry sink into oblivion after 2011 and be in 2012 as unpopular than before IYC, we have, in 2011 to address a right message to the right addressees. We must also think that after 2011, forces have to be joined to find more than words and promises, and we must ensure that a close-knit community is in place to face the future and tackle the key challenges our world is faced to.

The elements that will be presented in this lecture are as follows:

1. A few words about IUPAC
2. How to obtain an International Year?
3. Some things I learnt during the last 8 months; some recommendations
4. What about 2012 and after?

POZVANÉ PREDNÁŠKY

PP1

VYUŽITÍ SLOUČENIN VYŠŠÍCH TETRYLENŮ V KATALÝZE A MATERIÁLOVÉM INŽENÝRSTVÍ

Aleš Růžička

PP2

PRYSKYŘICE PRO PRŮMYSLOVOU DEMINERALIZACI VODY JAKO POMOCNÍCI SYNTETICKÉHO CHEMIKA

Pavel Pazdera¹, Barbora Andělová¹, Vladimíra Datinská¹, Marcela Chmielová¹, Dana Němečková¹, Markéta Procházková¹, Richard Ševčík¹, Jan Šimbera^{1,2} a Karel Zelinka^{1,2}

¹Centrum pro syntézy za udržitelných podmínek a jejich management, Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity, Kotlářská 2, 611 37 Brno, Česká republika, pazdera@chemi.muni.cz

²Lučební závody Draslovka a. s. Kolín, Havlíčkova 605, 280 99 Kolín IV, Česká republika, draslovka@draslovka.cz

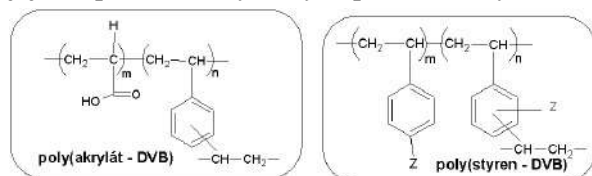
Pryskyřice pro průmyslovou demineralizaci vody, známé jako ionexy, resp. katexy pro výměnu kationů a anexy pro výměnu anionů, jsou v praxi používány více než 80 let.

Zpočátku [1] byly jako organické polymerní skelety používány produkty polykondenzace fenolů, naftolů, resp. anilinů (případně *N,N*-dialkylovaných) s formaldehydem. Později byly připraveny polymery na bázi styrenu. Aromatické složky pro polymerace, resp. polykondenzace zpravidla nesly kyselou funkční skupinu (karboxylová, sulfonová), chlormethylovou skupinu pro následné zavedení funkcionalizované aminoskupiny nebo aminomethylfosfonové skupiny, případně nesubstituované pryskyřice byly následně substituovány na aromátu např. sulfonací nebo chlormethylací.

V současnosti [2] jsou průmyslově používány polymery na bázi styrenu síťovaného divinylbenzenem, dále pak kopolymery (meth)akrylové kyseliny síťované buď divinylbenzenem nebo estery (meth)akrylové kyseliny s di- a trifunkčními alkoholy. Tyto kopolymery jsou buď sulfonované (silně kyselé katexy) nebo se využívá přítomné karboxylové funkce (slabě kyselé katexy). V případě anexů bývají aktuálně využívány jako aktivní funkce benzyltrialkylamoniové či propyltrialkylamoniové skupiny (silně bazické anexy) nebo

neutrální alkylované oligoalkylenaminy (slabě bazické anxy) [3].

V příspěvku budou demonstrovány současné hlavní typy průmyslových katexů a anxy. Budou uvedeny příklady aplikace zejména slabě kyselých anxy jako nosičů pro „solid supported“ a kombinatoriální syntézy jak s kovalentně, tak i ionově navázanými substráty nebo katalyzátory a jejich aplikace na vybraných příkladech syntéz.



Obř. 1 Základní strukturální motivy aktuálně používaných pryskyřičných skeletů

Výsledky byly získány díky finanční podpoře České republiky, Národní politika výzkumu II, Trvalá prosperita, projekt č. 2A-ITP1/090, poskytovatel dotace Ministerstvo průmyslu a obchodu ČR.

- [1] Jaromír Šmíd a kol., Měníče iontů, jejich vlastnosti a použití, SNTL Praha 1954.
- [2] Frederic P. Miller, Agnes F. Vandome, John McBrewster, Ion Exchange: Ion, Electrolyte, Solution, Coordination Complex, Polymer, Mineral, Ion-exchange Resin, Gel, Zeolite, Montmorillonite, Clay, Humus, Soil, Electric Charge, Amphoterism, Proton, Hydroxide, Sodium, Alphascript Publishing, 2010.
- [3] Emmanuel J. Zaganiaris, Ion Exchange Resins in Uranium Hydrometallurgy, BoD - Books on Demand Paris, 2009, str. 19 n.

PP3 REFORMA VYUČOVANIA CHÉMIE NA SLOVENSKU A KONFRONTÁCIA S PRÍRODOVEDNÝM VZDELÁVANÍM V EURÓPE

Jarmila Kmetřová¹, Ľubomír Held²

¹Katedra chémie, Fakulta prírodných vied UMB, Tajovského 40, 974 01 Banská Bystrica, Jarmila.Kmetova@umb.sk

²Katedra chémie, Pedagogická fakulta TU, Priemyselná 4, P.O.Box 9, 918 43 Trnava, lhheld@truni.sk

Globalizácia, vznik a fungovanie Európskej únie prináša podnety, ale aj podmienky a limity pre reformu národných školských systémov. Výsledky PISA 2009, ktoré boli zverejnené na konci roka 2010¹, ukazujú na výrazné zaostávanie Slovenska a aj Česka v oblasti všeobecného vzdelávania za špičkovými krajinami v rámci OECD. Prepad ČR vo výkonoch pätnásťročných

žiakov v matematickej a prírodovednej gramotnosti oproti výsledkom z roku 2006 je najdramatickejší zo všetkých zúčastnených krajín. Pritom výkony českých žiakov sú štatisticky významne lepšie od výkonov slovenských žiakov. Napriek tomu, že proti meraniam typu PISA existujú výhrady, sme presvedčení, že s poznaním limit takýchto meraní, možno výsledky racionálne využiť a odhadnúť tendencie najbližšieho vývinu prírodovedného vzdelávania².

Existujú indície a predpovede odborníkov, že zvolené reformné cesty nie sú najlepšie. Nepodarilo sa „nastaviť parametre“ vzdelávania na kvalitu. Možno očakávať, že v koncepcii prírodovedného vzdelávania v stredoeurópskom regióne príde k zásadnejším koncepčným posunom než sú tie, ku ktorým prišlo v dôsledku realizovaných reforiem od roku 2005 v Česku a od roku 2008 na Slovensku. Limitujúcim momentom reforiem jeaj vzdelávanie a úroveň vzdelanosti učiteľov chémie.

Prednáška chce konfrontovať tendencie v európskych krajinách so zámermi slovenskej reformy všeobecného chemického vzdelávania³. Pri pokuse o zásadnejšie zmeny v koncepcii chemického vzdelávania komunita didaktikov chémie potrebuje podporu pracovníkov chemickej vedy.

Prednáška mohla vzniknúť aj vďaka podpore VEGA 1/041/10.

- [1] Koršňáková, P. a kol: Národná správa OECD PISA Sk 2009. Bratislava : NÚCEM 2010.
- [2] Held, Ľ.: Konfrontácia koncepcií prírodovedného vzdelávania v Európe. In Sciencia in educatione. (2011) č. 2, s. 69 – 79. (www.scied.cz)
- [3] Risch, B. (Ed.): Teaching Chemistry around the World. Munster : Waxmann 2010.

PP4 MIKROBIÁLNE KULTÚRY V MLIEKARSTVE, VÝZNAM A FUNKCIE

Mária Greifová

PP5 PRÍSPEVOK KONVERZNÝCH PROCESOV K ZVÝŠENIU EFEKTÍVNOSTI RAFINÉRIE SLOVNAFT

Miroslav Švatarák

Slovnaft, a.s., Vlčie Hrdlo1, 824 12 Bratislava

Stúpajúca cena ropy sa od 70. rokov minulého storočia významne podpisuje pod ekonomiku

krajín. Neobišlo to ani krajiny bývalého „východného bloku“, preto sa aj tu začalo budovanie konverzných procesov na zvýšenie výťažkov motorových palív z ropy. Najvýznamnejšími konverznými procesmi sú krakovacie procesy, kde nosným pilierom je hydrokrak a fluidný katalytický krak. Tieto investične aj prevádzkovo náročné procesy dokážu udržať efektívnosť rafinérie aj v čase turbulencií na svetových trhoch, čo sa prejavilo v čase krízy v roku 2009.

Vo svojej prednáške popisujem tri krakovacie procesy využívané v Slovnafte a porovnanie efektívnosti rafinérie pri rovnakom spracovaní ropy a využívaní rôznej hĺbky krakovania ťažkých ropných podielov. Významnú úlohu tu hrá aj flexibilita výroby benzínu a motorovej nafty na Hydrokraku, čo umožňuje lepšie reagovať na požiadavky trhu.

Tak ako na všetkých výrobných jednotkách, aj na krakovacích jednotkách sa vyskytli rôzne technické a technologické problémy. Uvádžam najvýznamnejšie a popisujem akým spôsobom boli riešené. Táto časť prednášky je zameraná na prevádzkovanie jednotiek a môže byť inšpiráciou pre riešenie obdobných problémov v iných výrobných jednotkách.

PP6 STRUCTURAL AND FUNCTIONAL BASIS OF IMMUNE RESPONSE UPON *SCHISTOSOMA MANSONI* INFECTION

Helge Meyer^{1,2,3}, Konstantinos Tripsianes^{1,2},
Tobias Madl^{1,2}, Helmut Haas⁴, Gabriele
Schramm⁴, Michael Sattler^{1,2}

¹ Institute of Structural Biology, Helmholtz Zentrum
München Neuherberg, Germany

² Munich Center for Integrated Protein Science
(CIPSM) at Department Chemie, Technische
Universität München, Garching, Germany

³ Institute of Chemistry, University of Graz

⁴ Cellular Allergology, Research Center Borstel,
Borstel, Germany

Shistosomiasis, which amongst others is caused by the parasite *Schistosoma mansoni*, has been recognized as the most important helminthes infection in terms of morbidity and mortality. During infection with this parasite the deposition of schistosome eggs subsequently leads to a Th2 response triggered by the production of Interleukin 4. The protein IPSE which is secreted from *Shistosoma mansoni* eggs, has been identified as the major antigenic compound. The mechanism by which IPSE/alpha-1 activates

basophils turned out to be dependent on the presence of IgE on the surface of the basophils. However the mechanism of induction of immune response remains unclear.

We have determined the structure of IPSE by using solution NMR spectroscopy. The protein structure classifies IPSE as a non-lens member of the beta gamma -crystallin superfamily, albeit the very low sequence homology with known crystallin members. Nevertheless, the structure consisting of two Greek-key motifs with a basic 2-beta-sheet overall fold is highly conserved. A remarkable difference of IPSE to the other crystallins is the extended variable loop that links the two Greek-key motifs.

To investigate the function of IPSE in the regulation of the hosts immune response, we analyzed its interaction with IgE. NMR titrations revealed a large positively charged interaction surface on the IPSE molecule including the flexible loop. Single point mutations in this interface not only weaken the binding affinity but also compromise activation of basophils.

Taken together our structural and functional studies suggest a model for a novel mode of basophil activation.

PP7 NANOČÁSTICE STŘÍBRA – OBJEKT ZÁKLADNÍHO VÝZKUMU I KOMERČNÍCH APLIKACÍ

Libor Kvítek¹, Robert Pucek¹, Aleš Panáček¹,
Jana Soukupová¹, Martina Karlíková¹, Milan
Kolář²

¹Regionální centrum pokročilých technologií
a materiálů a Katedra fyzikální chemie,
Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého, Tř. 17.
listopadu 12, 77146 Olomouc, libor.kvitek@upol.cz

²Ústav mikrobiologie, Lékařská fakulta Univerzity
Palackého, Hněvotínská 3, 77515 Olomouc,
milan.kolar@upol.cz

Nanočástice stříbra vynikají mezi nanočásticemi jiných ušlechtilých kovů i dalších anorganických nanomateriálů nejen svými unikátními optickými a katalytickými vlastnostmi, ale obzvláště biologickou aktivitou. Ta je u kovového stříbra známa již tisíce let, ale teprve v nanočásticové podobě získává zcela nový aplikační rozměr [1].

V současnosti nejpoužívanější metody přípravy nanočástic stříbra vycházejí z redukce stříbrné soli vhodným redukčním činidlem za přítomnosti dalších látek, umožňujících změnu morfologie, velikosti či stability připravovaných částic. Mezi

těmito metodami vyniká svou jednoduchostí a vysokou reprodukovatelností metoda založená na Tollensově reakci, tedy redukci komplexního kationtu $[Ag(NH_3)_2]^+$ redukujícími cukry [2]. Takto lze velmi spolehlivě připravit nanočástice stříbra o průměrné velikosti okolo 25 nm s velmi úzkou velikostní distribucí a koncentrací stříbra okolo 100 mg/dm³. Tato disperze splňuje výtečně požadavky většiny aplikací, ať se již jedná o antibakteriální materiály nebo použití v povrchem zesíleném Ramanově rozptylu (SERS) či jako katalyzátoru v redukčních reakcích. Disperzi takto připravených nanočástic stříbra lze dále modifikovat řadou tenzidů a polymerů, které zvyšují nejen jejich agregátní stabilitu, ale rovněž zlepšují aplikační vlastnosti stříbrných nanočástic, zejména jejich biologickou aktivitu [3]. Manipulovatelnost s tak malými stříbrnými nanočásticemi lze bez ztráty jejich biologické aktivity dále zvýšit vytvořením jejich kompozitu s uhlíkatými materiály, např. adsorpcí nanočástic na aktivní uhlí.

Tato práce byla podpořena projekty OP VaVpI reg. číslo CZ.1.05/2.1.00/03.0058, MŠMT ČR MSM6198959218 a MSM6198959223, GAČR GAP304/10/1316 a vnitřním grantem UP Olomouc PrF_2011_020.

- [1] X. Chen, H. J. Schluesener: *Toxicol. Lett.* 176, 1 (2008)
 [2] L. Kvítek, R. Prucek, A. Panáček, R. Novotný, J. Hrbáč, R. Zbořil: *J. Mat. Chem.* 15, 1099 (2005)
 [3] L. Kvítek, A. Panáček, J. Soukupová, M. Kolář, R. Večeřová, R. Prucek, M. Holecová, R. Zbořil: *J. Phys. Chem. C* 112, 5825 (2008)

PP8 ENANTIOSELEKTIVNÍ OXIDACE KATALYZOVANÉ CHIRÁLNÍMI FLAVINIOVÝMI SOLEMI

Radek Cibulka¹, Tomáš Kraus², Viktor Mojr¹,
Radek Jurok¹

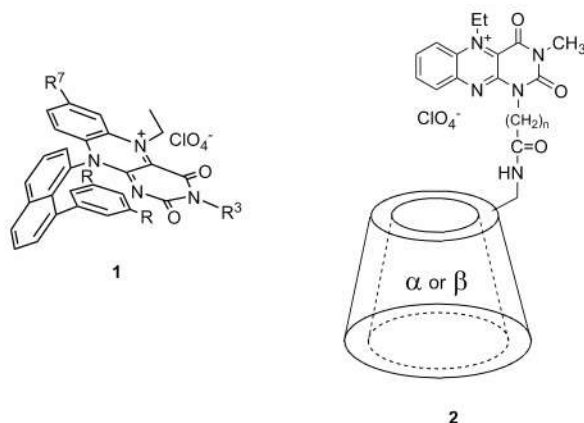
¹Ústav organické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 16628 Praha 6, cibulka@vscht.cz

²Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i., Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha 6.

Flaviniové soli představují perspektivní katalyzátory oxidačních reakcí s využitím peroxidu vodíku nebo kyslíku jako terminálních oxidačních činidel [1]. Mechanismus oxidací katalyzovaných flaviniovými solemi je analogický mechanismu oxidací probíhajících za účasti flavinových kofaktorů v monooxy-

genasách. V prvním kroku se tvoří flavinhydroperoxid, který následně oxiduje substrát. Příkladem reakcí katalyzovaných flaviniovými solemi jsou oxidace sulfidů na sulfoxidy, terciárních aminů na *N*-oxidy a cyklických ketonů na laktony.

V naší laboratoři byly připraveny chirální flaviniové soli **1** a **2**, které účinně katalyzují enantioselektivní oxidace sulfidů na sulfoxidy [2,3] a Baeyerovy-Villigerovy oxidace peroxidem vodíku. Každá z uvedených skupin katalyzátorů využívá při stereoindukci jiného mechanismu. V případě solí **1** se substrát váže k reaktivní formě planárně chirálního flavinu π - π interakcí. Proto jsou katalyzátory **1** vhodné zejména pro oxidace substrátů obsahujících aromatické jádro. V případě konjugátů flavinu s cykloextrinem **2** dochází k tvorbě inkluzního komplexu substrátu s cykloextrinovou podjednotkou, která je chirální. V závislosti na velikosti kavity cykloextrinu jsou katalyzátory **2** účinné při oxidacích alifatických substrátů nebo aromatických substrátů a substrátů s objemnými substituenty. V přednášce bude diskutován vliv jednotlivých strukturálních prvků katalyzátorů na stereoselektivitu oxidací a možné využití flaviniových solí při přípravě farmaceuticky významných látek.



Autoři děkují Grantové agentuře České republiky (projekt č. 203/07/1246) a Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy (projekt č. LC06070) za finanční podporu.

- [1] F. G. Gelalcha, *Chem. Rev.* 2007, 107, 3338-3361.
 [2] V. Mojr, V. Herzig, M. Buděšínský, R. Cibulka and T. Kraus, *Chem. Commun.* 2010, 46, 7599-7601.
 [3] R. Jurok, R. Cibulka, H. Dvořáková, F. Hampl and J. Hodačová, *Eur. J. Org. Chem.* 2010, 5217-5224.

PREDNÁŠKY - SEKCIA 1: ANALYTICKÁ A FYZIKÁLNA CHÉMIA

1P01 NOVÉ SMĚRY V ELEKTROANALYTICKÉ CHEMII BIOLOGICKY AKTIVNÍCH LÁTEK

Jiří Barek, Aleš Daňhel, Hana Dejmková, Dana Deýlová, Jan Fischer, Vít Novotný, Lenka Němcová, Vlastimil Vyskočil, Oxana Yosypchuk, Jiří Zima

Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Hlavova 2030/8, 128 43 Praha 2, barek@natur.cuni.cz

Rostoucí požadavky na sledování biologicky aktivních organických látek v nejrůznějších environmentálních či biologických matricích se odráží i v rostoucím počtu aplikací moderních voltmetrických a amperometrických metod k těmto účelům. Možnosti a omezení těchto metod budou demonstrovány na příkladech postupů vyvinutých v posledním období v UNESCO laboratoři elektrochemie životního prostředí. Pozornost bude věnována zejména využití borem dopovaných diamantových filmových elektrod [1] k voltametričkému či amperometričkému stanovení elektrochemicky oxidovatelných látek a různých typů amalgámových elektrod [2] (tuhých, pastových, kompozitních či krystalových) ke stanovení elektrochemicky redukovatelných látek, v jejichž případě mohou v řadě případů úspěšně nahradit elektrody rtuťové. Diskutovány budou i možnosti eliminace pasivace pracovní elektrody, což bývá největší problém při praktické aplikaci voltmetrických či amperometričkých metod a možnosti zvýšení citlivosti a selektivity elektrochemických stanovení pomocí předběžné separace a prekoncentrace. Pozornost bude věnována i využití netradičních elektrodových materiálů a upořádání pro stanovení environmentálních karcinogenů, vybraných pesticidů [3], protinádorových léčiv a dalších prakticky významných analytů pomocí HPLC a FIA s amperometričkou detekcí. Diskutovány budou i možnosti a omezení sítotiskových elektrod v této oblasti a možnosti použití chemicky a biologicky modifikovaných elektrod.

Tato práce byla finančně podpořena Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy České republiky

(projekty LC 06035, MSM 0021620857 a RP 14/63), Grantovou Agenturou České republiky (projekt P206/10/P087) a projektem SVV 2011-263204.

- [1] Karolina Pecková, Jana Musilová, Jiří Barek, Jiří Zima: Voltammetric and amperometric determination of organic pollutants in drinking water using boron doped diamond film electrodes. V knize Progress on Drinking Water Research (Eds: M. H. Lefebvre and M. M. Roux), Nova Science Publishers, New York 2008, str. 103.
- [2] Jiří Barek, Dana Cabalková, Jan Fischer, Tomáš Navrátil, Bogdan Yosipchuk, Karolina Pecková: Environ. Chem. Let. 9, 83 (2011)..
- [3] Jan Fischer, Jiří Barek, Hana Dejmková: Cur. Org. Chem, v tisku (2011).

1P02 NOVÉ MOŽNOSTI AMPÉROMETRICKÉ DETEKCE AMINODERIVÁTŮ POLYCYKLICKÝCH AROMATICKÝCH UHLOVODÍKŮ V HPLC

Hana Dejmková, Jiří Barek, Jan Dědík, Marcela Janovcová, Lucie Maixnerová, Šárka Ramešová, Jaroslava Zavázalová, Karolina Pecková

Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Albertov 6, 128 43 Praha 2, kpeckova@natur.cuni.cz

Elektrochemická detekci se díky citlivosti, širokému dynamickému lineárnímu rozsahu a relativní selektivitě stále uplatňuje v průtokových systémech, jako je vysokoúčinná kapalinová chromatografie či průtoková injekční analýza [1]. Konstrukce ampérometričkých detektorů pro kapalinovou chromatografii je vedena snahou vyhovět chromatografickým a elektrochemickým požadavkům na geometrii detekčních cel. Spolehlivých výsledků a nízkých detekčních limitů lze mnohdy dosáhnout při jednoduché konstrukci detektorů bez speciálních komplikovaných prvků. Dalším problémem je volba vhodného elektrodového materiálu, tak aby byla zaručena kompatibilita s mobilní fází, dostatečně široké potenciálové okno, dlouhodobá stabilita odezvy, nízká toxicita a odolnost proti pasivování [2-3]. V tomto příspěvku budou představena některá nová uspořádání či elektrodové materiály, které byly použity pro ampérometričkou detekci genotoxických aminoderivátů naftalenu a bifenyly v průtokových metodách, konkrétně: (i) "Wall-jet" uspořádání v přepadové nádobce pro detekci na borem dopované diamantové filmové indikační elektrodě; (ii) detekční cela s platinovou mikrocyklrickou indikační elektrodou a (iii)

detekční cela se sítotiskovou uhlíkovou pastovou elektrodou. Základní operační parametry těchto detektorů (např. citlivost, limit detekce, lineární dynamický rozsah atd.) splňují požadavky na detekci uvedených analytů v širokém koncentračním rozmezí až do submikromolárních koncentrací. Předběžná separace a prekoncentrace s využitím extrakce tuhou fází umožňuje jejich stanovení v modelových environmentálních, biologických (moč) a potravinářských (barviva) matricích.

Tato práce byla finančně podporována Grantovou agenturou Univerzity Karlovy v Praze (projekt GAUK 92010), Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (projekt LC 06035, MSM 0021620857 a RP 14/63) a projektem SVV 2011-263204.

- [1] Karel Štulík, Věra Pacáková: Elektroanalytická měření v proudících kapalinách. SNTL, Praha (1989).
 [2] Jiří Barek, Jan Fischer, Tomáš Navrátil, Karolina Pecková, Bogdan Yosypchuk, Jiří Zima: *Electroanalysis* 19, 2003 (2007).
 [3] Marek Trojanowicz: *Analytica Chimica Acta* 688, 8 (2011).

1P03

ELECTROCHEMICAL BIOSENSORS FOR THE DETECTION OF DNA DAMAGE CAUSED BY ORGANIC ENVIRONMENTAL POLLUTANTS

Vlastimil Vyskočil, Zuzana Krejčová, Mária Fařarová and Jiří Barek

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

In recent years, a growing interest has arisen in the development of a simple, rapid and user-friendly method for centralized screening of genotoxic organic pollutants in various environmental matrices [1]. Electrochemical DNA biosensors, realized by immobilizing an oligonucleotide sequence or the calf thymus DNA on a suitable electrode surface, are simple to assemble and can provide reliable results; such DNA biosensors hold an enormous potential for on site detection of food contamination and for environmental monitoring [2].

Moreover, the electrochemical DNA biosensor enables preconcentration of the investigated hazardous compounds onto the sensor surface and the *in situ* electrochemical generation of radical intermediates, which can also cause damage to

the DNA immobilized on the electrode surface and which can be detected voltammetrically. Therefore, voltammetric methods represent an inexpensive and fast detection procedure that can contribute to the elucidation of the mechanism through which DNA is oxidatively damaged by perilous organic compounds, in an approach to the real scenario that occurs in the living cell, and also represent a complementary tool for the study of biomolecular interaction mechanisms [3].

The possibilities, advantages and limitations of these electrochemical DNA biosensors for DNA hybridization and for the detection of genotoxic organic compounds will be demonstrated in this contribution.

Financial support of this work, provided by The Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (Projects MSM 0021620857, LC 06035 and RP 14/63) and by the Project SVV 2011-263204, is gratefully acknowledged.

- [1] Giovanna Marrazza, Iva Chianella, Marco Mascini: *Anal. Chim. Acta*, 387, 297-307 (1999).
 [2] Vlastimil Vyskočil, Ján Labuda, Jiří Barek: *Anal. Bioanal. Chem.*, 397, 233-241 (2010).
 [3] Victor Constantin Diculescu, Ana-Maria Chiorcea Paquim, Ana Maria Oliveira Brett: *Sensors*, 5, 377-393 (2005).

1P04

DÔLEŽITOSŤ ÚPRAVY VZORKY PRE ULTRASTOPOVÚ ANALÝZU ORGANICKÝCH POLUTANTOV

Andrea Hercegová¹

Ústav analytickej chémie FCHPT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, andrea.hercegova@stuba.sk

V chromatografickej analýze polutantov, konkrétne pesticídov, na ultrastopových koncentračných hladinách sa očakáva taká príprava vzorky, ktorá umožňuje predkoncentráciu, postačujúce odstraňovanie zložiek matrice za súčasného zachovania vysokých výťažností a dobrej presnosti. Vývoj prípravy vzorky v multireziduálnej analýze pesticídov plynovou chromatografiou, napríklad v netukových potravinách, zahŕňa jednoduchú extrakciu kvapalinou s následným rozdeľovaním kvapalina-kvapalina (L-L) po čistiace metódy extraktov využitím extrakcie tuhú fázou (SPE) [1]. Následný výskum sa orientoval na vývoj alternatívnych metód, ako disperzná extrakcia tuhú fázou (MSPD), superkritická fluidná extrakcia (SFE), mikroextrakcia tuhú fázou (SPME) na redukciu spotreby rozpúšťadiel

a manuálnej práce [2]. Napriek ich výhodám žiadna z týchto techník neprekonalala určité nedostatky, alebo limitácie v praktickom využití a tým uvedené metódy nedosiahli širokú implementáciu [3]. Disperzná SPE však predstavuje sľubnú metódu pre prípravu vzorky pre rezíduá pesticídov [3]. Súčasné multireziduálne metódy umožňujúce stanovenie rezíduí pesticídov napr. na koncentračnej hladine 10 µg/kg vyžadujú pomerne drahú a vysoko sofistikovanú inštrumentáciu, ako GC-MS-MS. Preto je potrebná ďalšia optimalizácia existujúcich metód, alebo vývoj nových metód poskytujúcich spoľahlivé výsledky na vyžadovanej hladine koncentrácie využitím bežnej rutinnej inštrumentácie.

Práca bola finančne podporovaná Vedeckou grantovou agentúrou MŠ SR – projekt VEGA č. 1/0647/11

- [1] F.J. Schenk, S. J. Lehotay, V. Vega, J. Sep. Sci., 25 (2002) 883
 [2] M. Kirchner, E. Matisová, Chem. Listy. 98 (2004) 396
 [3] M. Anastassiades, S.J. Lehotay, D. Štajnbaher, F.J. Schenk, J. AOAC Intern. 86 (2003) 412

1P05 IDENTIFICATION OF PESTICIDE RESIDUES UTILIZING CHROMATOGRAPHY AND MASS SPECTROMETRY

Svetlana Hrouzková

Institute of Analytical Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, SK, svetlana.hrouzkova@stuba.sk

Pesticides have been worldwide used for the protection of food crops against pests and diseases. It is common that residues of these pesticides occur in food products, especially agricultural commodities. Newly discovered ecotoxicological problems, particularly the knowledge on endocrine disrupting effects related also to pesticide residues, emphasize the acute requirement of analytical methods development with increased sensitivity and reliability for monitoring, confirmation and quantification of lower residue levels.

The urgent requirement for low-level analyses promotes the contribution to the science – in the field of separation methods analysis of toxic organic pollutants in complex samples. The most efficient approach to pesticide residues analysis

involves the use of chromatographic methods. Especially, fast gas chromatography (GC) and fast liquid chromatography (LC) are the beneficial options since the decreased total time of analysis results in an increased sample throughput and consequently, the laboratory operating costs can be reduced significantly [1]. Mass Spectrometry (MS) is an analytical technique used to identify and quantify the compounds in a sample by their characteristic mass spectral pattern [2]. MS is combined with a separation technique to obtain powerful e.g. GC-MS and LC-MS, or GC-MS/MS resp. LC-MS/MS systems for analyzing complex mixtures and identifying the components.

The aim of the contribution is directed toward instruments progress and method development with respect to their applications for detecting pesticide residues, the possibilities and the drawbacks of identification by chromatographic methods connected with MS and the example of some unexpected problems are highlighted. Specificity of pesticide residues analysis as well as problems associated with analysis of pesticides by fast gas chromatography are discussed.

Acknowledgement. This work was supported by the Scientific Grant Agency VEGA project No. 1/0390/09 and No. 1/0647/11.

- [1] Hrouzková S., Matisová E.: in: Pesticides - Strategies for Pesticides Analysis, Margarita Stoytcheva (Editor), Chap. 6, p. 131. InTech, 2011. <http://www.intechopen.com/articles/show/title/fast-gas-chromatography-and-its-use-in-pesticide-residues-analysis>
 [2] Lehotay, S.J., Maštovská, K., Amirav, A., Fialkov A.B., Alon, T., Martos, P.A., deKok, A., Fernández-Alba, A.R. (2008) Identification and confirmation of chemical residues in food by chromatography-mass spectrometry and other techniques. Trends in Anal. Chem, 27, 1070-1090

1P06 ZÁKLADNÉ ASPEKTY A APLIKÁCIE MINIATURIZOVANÝCH ANALYTICKÝCH SYSTÉMOV V ELEKTROSEPARAČNÝCH METÓDACH

Marián Masár¹, Pavol Kruk¹, Milan Luc¹,
Ladislav Danč¹, Michal Horčíciak¹, Peter Troška¹

¹*Katedra analytickej chémie, Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského v Bratislave, Mlynská dolina CH-2, SK-84215 Bratislava, masar@fns.uniba.sk*

Jednou zo súčasných veľkých výziev v oblasti analytickej inštrumentácie je vývoj tzv. miniaturizovaných totálnych analytických

systémov (μ TAS), nazývané aj laboratórium na čipe („lab-on-a-chip“). Tieto systémy integrujú všetky funkcie moderného analytického laboratória, t.j. úpravu vzorky, separáciu a detekciu analytov, príp. post-čipovú („post-chip“) manipuláciu so vzorkou. Koncepcia laboratória na čipe je v súčasnosti veľmi atraktívna najmä v analytických a bioanalytických vedách [1].

Tento príspevok sa zameriava na niektoré metodologické a aplikačné aspekty kapilárnej elektroforézy (CE) v miniaturizovaných analytických systémoch (CE čipoch), ktoré si získali kľúčové postavenie v „lab-on-a-chip“ systémoch. O prudkom rozvoji tohto nového trendu v analytickej chémii svedčí aj fakt, že za obdobie posledných 10 rokov (2001-2010) predstavuje podiel vedeckých prác publikovaných v oblasti čipovej elektroforézy cca. 15 % z celkového počtu prác publikovaných v oblasti CE podľa databázy „Web of Science“.

Miniaturizované CE analytické systémy zvyšujú požiadavky kladené na úpravu vzorky, najmä ak je cieľom dosiahnutie nízkych koncentračných limitov detekcie pre analyty. On-line spojenie CE metód na čipoch využívajúcich techniku spájania separačných kanálikov (CC) je možné považovať za veľmi efektívny prostriedok na integráciu úpravy vzorky s CE separáciou v zmysle koncepcie „lab-on-a-chip“ [2]. V tejto súvislosti budú ukázané možnosti využitia CC technológie na CE čipoch pre stanovenie stopových koncentrácií analytov vo veľmi komplexných environmentálnych a biologických maticiach [3].

Príspevok je venovaný pamiatke prof. RNDr. Dušana Kanianskeho, DrSc., zakladateľa školy kapilárnej elektroforézy na Slovensku a vznikol za finančnej podpory projektov VEGA 1/0672/09, VVCE-0070-07 a OPVaV-2009/4.1/02-SORO (Centrum excelentnosti CE Green II).

- [1] C.S. Henry (Editor): Microchip capillary electrophoresis. Methods and protocols, Humana press, Totowa, New Jersey, 2006
 [2] D. Kaniansky, M. Masár, J. Bielčíková, F. Iványi, F. Eisenbeiss, B. Stanislawski, B. Grass, A. Neyer, M. Jöhnck: Anal. Chem., 72 (2000) 3596
 [3] D. Kaniansky, M. Masár, R. Bodor, M. Žúborová, E. Ölvecká, M. Jöhnck, B. Stanislawski: Electrophoresis, 24 (2003) 2208

1P07

OXYGEN REDUCTION AT PLATINUM-PALLADIUM ELECTROCATALYSTS ON A CARBON SURFACE

Daniel Mísicak, Attila Gaal and W. Ronald Fawcett

¹University of California in Davis, 1 Shields Ave., 95616, Davis, CA, USA, dmisicak@gmail.com

Fuel cell systems are one of the most promising green energy devices which generate electricity with zero harmful emissions. The primary bottle neck to fuel cell technology and an area of great research interest is the platinum catalyst (Pt) used for the oxygen reduction reaction (ORR) on the electrode surface [1].

Our goal was to prepare decorated glassy carbon (GC) electrodes for maximum ORR performance with the smallest possible catalyst loading. Two different deposition techniques were used to prepare Pt/Pd mixture on the GC electrode surface. By the first technique to maximize Pt utilization, the underpotential deposition (UPD) technique [2] was used to create an atomic monolayer of Pt. In the second approach, Pt was deposited directly from solution containing PtCl_6^{2-} ions, creating a multilayered catalyst coating on the electrode surface. Our best electrode was prepared by the direct deposition method with ratio and amount 21.8 : 197 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ Pt : Pd on GC surface (Figure 1C). We confirmed the well known Pd “boosting effect” on Pt [3], and in addition we found an ideal amount and ratio of these precious metals. This electrode showed the best catalytic activity and outperformed all other electrodes used for the ORR.

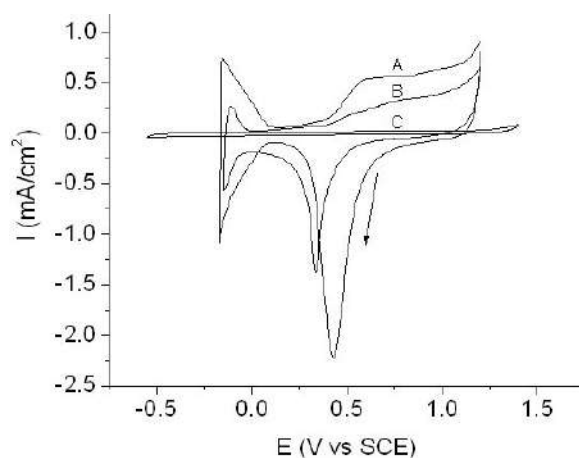


Figure 1: Cyclic voltammograms of GC (A), Pd/GC (B) and Pt/Pd/GC (C) electrodes in 0.1 M HClO_4 solution at a scan rate 50 mV/s.

The financial support of NSF (grant CHE-0906373) is gratefully acknowledged.

- [1] D. Misticak, T. C. Ruthenburg, and W. R. Fawcett: *Electrochimica Acta*, vol. 55, 2010 p. 7610.
 [2] S.R. Brankovic, J.X. Wang, R.R. Adzic, *Surf. Sci.* 474, 2001, p L173.
 [3] J. Zhang, Y. Mo, M.B. Vukmirivic, R. Klie, K. Sasaki, R.R. Adzic: *J. Phys. Chem. B*, 108, 2004, p 10955.

1P08

VYUŽITÍ DVOUROZMĚRNÉ ELEKTROFORÉZY KE STUDIU PROTEOMU DENTINU LIDSKÝCH ZUBŮ

Michal Jágr¹, Adam Eckhardt^{1,2}, Statis Pataridis¹, Ivan Mikšík^{1,2}

¹Fyziologický ústav AV ČR, v.v.i., Vídeňská 1083, 142 20 Praha 4, ²Centrum kardiovaskulárního výzkumu, Vídeňská 1083, 142 20 Praha 4, jagr@biomed.cas.cz

Mezi jedny z významných vědeckých úkolů současnosti patří výzkum proteomu lidského organismu[1]. Naše pozornost v tomto projektu byla věnována výzkumu dentinu lidských zubů.

Zubní dentin se skládá z anorganického materiálu (70 %), dále z organické matrice (20 %) a zbytek je tvořen glykoproteiny, fosfolipidy a volně vázanou vodou. Proteiny organické matrice hrají významnou roli jak při vlastním formování dentinu, tak i při jeho následné mineralizaci, přičemž defekty v aminokyselinové sekvenci některých proteinů mohou vést k vážným vývojovým vadám zubu. Do dnešní doby byla organická matrice dentinu popsána jako komplexní směs proteinů obsahující metabolické enzymy, proteiny zúčastní se buněčné stavby či přenosu signálů, stresové faktory, transportní proteiny, proteiny imunitní odezvy i proteiny s neznámou funkcí [2, 3].

V naší studii jsme použili originální přípravu vzorků a analyzovali je metodou dvourozměrné elektroforézy (2-DE). Jako první jsme takto získali dvourozměrnou proteinovou mapu lidského dentinu. Nalezené proteiny byly štěpeny trypsinem a analyzovány na nLC chromatografu připojeném k tandemovému hmotnostnímu spektrometru (Q-TOF) s vysokým rozlišením. Ve vzorcích se nám podařilo identifikovat přes 260 proteinů vyskytujících se s různou mírou relativního zastoupení a majících širokou škálu funkcí. Některé z nalezených proteinů byly v dentinu lidských zubů identifikovány poprvé, přičemž již byly popsány v dentinu zubů jiných

organismů nebo jejich výskyt byl potvrzen v jiných částech lidského těla. Jiné proteiny byly v lidském těle detekovány vůbec poprvé.

Tato práce vznikla za podpory grantů GA ČR 203/09/0675 a GA ČR 203/08/1428.

- [1] Rabilloud T., Chevallet M., Luche S., Lelong C.: *J. Proteomics* 73, 2064 (2010).
 [2] Park E.S., Cho H.S., Kwon T.G., et al.: *J. Proteome Res.* 8, 1338 (2009).
 [3] Chun S.Y., Lee H.J., Choi Y.A., et al.: *Tissue Eng. Part A* 17, 181 (2011)

1P09

CONCEPT OF DNA-BASED BIOSENSORS

Ján Labuda

Institute of Analytical Chemistry, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, jan.labuda@stuba.sk

Since 1990-ies the deoxyribonucleic acid, DNA, and other nucleic acids, NA, have been utilized as the biorecognition elements at so called DNA or nucleic acids biosensors. These biosensors can be characterized as devices that integrate nucleic acid as the biological recognition element and a physicochemical transducer (e.g. an electrode). As it is typical at enzyme, immuno and other biosensors, they are divided into subgroups according to the transducer material and function. Rather popular electrochemical NA biosensors are often presented as electrodes chemically modified by nucleic acid. Optical, piezoelectrotric, and impedimetric NA biosensors are also widely developed and used.

The DNA-based biosensors possess specificity of the response typical for biosensors taking an advantage of the bioaffinity of DNA. In difference to enzyme- and immuno-sensors, the DNA biosensors are mostly used for the investigation of DNA interactions rather than for a conventional analytical determination of an analyte concentration. They exhibit selectivity/specificity to the analyte (e.g. nucleotide bases sequence, protein) or class selectivity to DNA itself (e.g. damage to DNA). Thus, the DNA-based biosensors represent irreplaceable testing (bio)analytical devices applied to the detection of NA sequences, effects of risk chemicals and drugs, evaluation of pro- and antioxidants [1, 2].

Acknowledgment: This work was financially supported by the Grant Agency VEGA (projects 1/0852/08 and 1/0182/11).

- [1] Jan Labuda, Ana M. Oliveira Brett, Genady Evtugyn, Miroslav Fojta, Marco Mascini, Mehmet Ozsoz, Ilaria Palchetti, Emil Paleček, Joe Wang: *Pure Appl. Chem.* 82, 1161–1187 (2010).
- [2] Jan Labuda: In: *Nucleic Acid Biosensors for Environmental Pollution Monitoring*, Eds. M. Mascini and I. Palchetti, ISBN: 978-1-84973-269-7, DOI:10.1039/9781849732697, Royal Society of Chemistry, 2011. pp. 121-140.

1P10**MOŽNOSTI NEPRIAMEJ
VOLTAMPÉROMETRICKEJ DETEKCIE
FLUORIDOVÝCH ANIÓNOV**

Peter Tomčík¹, Eva Culková¹, Lubomír Švorc²,
Miroslav Rievaj², Dušan Bustin²

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

²*Ústav analytickej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovenská Republika.*

Jednoduché anióny a ich deriváty hrajú dôležitú úlohu v biologických, chemických a technologických procesoch. Fluoridový anión sa pridáva do zubnej pasty na prevenciu zubného kazu, preto je potrebné ho rýchlo, citlivo a spoľahlivo detegovať. V tomto príspevku predstavujeme novú analytickú techniku pre stanovenie fluoridov ktorá je založená na dynamickej elektrochémii ako rýchlejšiu alternatívu k statickej potenciometrickej analýze založenej na použití iónovoselektívnych elektród s membránou tvorenou kryštálom LaF₃. Voltampérometrická detekcia fluoridového iónu je založená na jeho komplexácii trojmocným železom. Vzniknutý fluorokomplex je elektroinaktívny pri potenciáli katodickej redukcie voľného akvatovaného trojmocného železa, preto jeho limitný difúzny prúd za prítomnosti fluoridov klesá. Optimalizáciou podmienok merania, v 0.2 mol.L⁻¹ NaCl a hodnote pH okolo 5 sa získal detekčný limit $4,5 \times 10^{-5}$ mol.L⁻¹, keď sa ako pracovná elektróda použije jeden segment interdigitovaného súboru mikroelektrod z platiny tvaru hrebeňa. Získaná hodnota detekčného limitu je o jeden poriadok menšia ako pri klasickej platinovej makroelektrode. Je to zapríčinené prekryvom difúzných vrstiev digitov mikroelektrodového súboru, čo spôsobuje zlepšenie pomeru signálu k šumu. Metóda bola aplikovaná na modelové aj reálne vzorky zubnej pasty. Okrem rýchlosti je presnejšia, pretože

antilogaritmovanie Nernstovej odozvy ISE fluoridoselektívnej elektródy zavádza do výsledku chybu.

Práca bola podporená Grantovou agentúrou Pedagogickej fakulty KU projekt č. GAPF 1/15/2011 a agentúrou VEGA projekt č. 1/0066/09

- [1] Monika Čerňanská, Peter Tomčík, Zuzana Jánošíková, Miroslav Rievaj, Dušan Bustin: *Talanta* 83, 1472 (2011)

1P11**ŠPECIAČNÁ ANALÝZA VYBRANÝCH
PRVKOV**

Manová Alena, Beinrohr Ernest, Čacho František,
Labuda Ján

Ústav analytickej chémie, Fakulta Chemickej a potravinárskej technológie, STU Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia, e-mail: alena.manova@stuba.sk

Arzén v súčasnosti patrí v analytických laboratóriách medzi „módne“ stopové prvky a to hlavne pre nedávne zníženie jeho maximálnej koncentrácie v pitných vodách z 50 µg/L na 10 µg/L a pre diametrálne rozdielne toxikologické vlastnosti jeho rôznych chemických foriem. Tak znížený koncentračný limit ako aj požiadavky špeciálnej analýzy kladú na analytické metódy zvýšené požiadavky.

Pomerne jednoduchý princíp na rozlíšenie dvoch základných foriem anorganického arzenu, As(III) a As(V) a to aj pri nízkych koncentráciách ponúka elektrochémia: As(III) možno pomerne jednoducho vylúčiť na zlatej alebo pozlátenej elektróde, zatiaľ čo sa As(V) prakticky nevylúči. Tým ich možno od seba oddeliť. Vylúčený arzén možno potom elektrochemicky rozpustiť a stanoviť v roztoku dostatočne citlivou analytickou metódou, napr. elektrotermickou AAS. Vzorka okyslená kyselinou chlorovodíkovou sa podrobila prietokovej elektrolyze, počas ktorej sa As(III) prakticky kvantitatívne vylúčil na pozlátenej poréznej elektróde. V ďalšom kroku sa depozit rozpustil do zriedenej kyseliny dusičnej a roztok sa analyzoval elektrotermickou AAS. Celkový arzén a tým aj podiel As(V) bolo možné stanoviť po predchádzajúcej redukcii na As(III). Lepšie detekčné limity však ponúka on-line prepojenie elektrochemickej prekoncentračnej cely s grafitovou pieckou AAS prístroja.

Táto práca vznikla za podpory Vedeckej grantovej agentúry VEGA, projekt č. 1/0182/11.

1P12**NANOSTRUCTURED SILVER AND PLATINUM MODIFIED CARBON FIBER MICROELECTRODES COATED WITH NAFION FOR H₂O₂ DETERMINATION**Vladimir Halouzka¹, Petr Jakubec, Jan Hrbac¹*Department of Physical Chemistry, Palacky University, tr. 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, Czech Republic*

Carbon fiber electrodes represent an advantageous platform for amperometric sensors fabrication, since they combine microelectrode properties (i.e. enhanced diffusional transport of the analyte onto the electrode surface) with relatively high analytical current signals. Their disadvantage is, however, a slow charge transfer kinetics for some analytes requiring the modification of these electrodes.

Carbon fiber microelectrodes equipped with nanostructured metals (platinum and silver) and covered with a Nafion layer constitute sensitive H₂O₂ sensors. Metallic layers on carbon fibers were prepared by surfactant assisted electrodeposition. In the case of silver, the procedure leads to coating which is composed of porous, partially aggregated and crystalline deposits containing silver nanoparticles. The electrodeposition of platinum leads to carbon fiber decorated with clusters of platinum nanoparticles. After coating the electrodes with protective and antiinterference barrier made of Nafion, the sensing properties of the prepared microelectrodes towards hydrogen peroxide are investigated.

Financial support from the Grant Agency of the Czech Republic (project no. 524/05/P135) and project no. PrF-2011-020-Nanosystemy are gratefully acknowledged.

1P13**BINÁRNÍ MAGNETICKÉ NANOKOMPOZITY OXIDŮ ŽELEZA A NANOČÁSTIC STŘÍBRA A JEJICH ANTIMIKROBIÁLNÍ VLASTNOSTI**Martina Kílianová¹, Robert Pucek¹, Jiří Tuček², Aleš Panáček¹, Libor Kvítek¹, Milan Kolář³*¹Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Katedra fyzikální chemie,**Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého, Tř. 17. listopadu 12, 77146 Olomouc,**martina.kilianova@upol.cz**²Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Katedra experimentální fyziky,**Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého, Šlechtitelů 11, 78371 Olomouc**³Ústav mikrobiologie, Lékařská fakulta Univerzity Palackého, Hněvotínská 3, 77515 Olomouc*

Magnetické nanokompozity představují jeden z významných příspěvků k současnému rozvoji nanotechnologií. Díky jejich magnetické složce mohou být účelně transportovány externím magnetickým polem na určené místo v lidském těle [1]. Magnetické nanokompozity s nanočásticemi stříbra jsou předurčeny pro použití v medicíně pro cílené doručování aktivní látky – nanočástic stříbra, které vykazují výrazné antimikrobiální účinky [2].

Byly připraveny dva typy magnetických nanokompozitů obsahující nanočástice stříbra, Ag@Fe₃O₄ a γ-Fe₂O₃@Ag, pomocí chemické redukce stříbrných iontů D-maltosou v přítomnosti oxidů železa a molekul sodné soli kyseliny polyakrylové. Připravené nanokompozity byly charakterizovány transmisí elektronovou mikroskopií, X-ray práškovou difrakcí, Mössbauerovou mikroskopií, SQUID magnetometrií a atomovou absorpční spektroskopií. Dále byly testovány jejich antibakteriální a antifungální aktivity a cytotoxicita nanokompozitů. Magnetický příspěvek přinášejí nanočástice magnetitu (Fe₃O₄) a velmi jemné nanočástice maghemitu (γ-Fe₂O₃). Oba nanokompozity vykazují značnou antimikrobiální aktivitu. Pro testované kmeny bakterií se minimální inhibiční koncentrace (MIC) pohybuje v rozmezí 15,6 mg/L až 125 mg/L a pro testované druhy kvasinek je MIC v rozmezí 1,9 mg/L do 31,3 mg/L. Oproti tomu, akutní cytotoxicita proti testovaným embryonálním fibroblastům myši byla objevena při koncentraci větší než 430 mg/L (Ag@Fe₃O₄) a 292 mg/L (γ-Fe₂O₃@Ag) [3].

Tato práce byla podpořena projekty OP VaVpI reg. číslo CZ.1.05/2.1.00/03.0058, MŠMT ČR MSM6198959218 a MSM6198959223, GAČR GAP304/10/1316 a vnitřním grantem UP Olomouc PrF_2011_020.

- [1] S. Xuan, F. Wang, J. M. Y. Lai, K. W. Y. Sham, Y.-X. J. Wang, S.-F. Lee, J. C. Yu, Ch. H. K. Cheng, K. Ch.-F. Leung: ACS Appl. Mater. Interfaces 3, 237 (2011)
- [2] A. Panáček, M. Kolář, R. Večeřová, R. Pucek, J. Soukupová, V. Kryštof, P. Hamal, R. Zbořil, L. Kvítek: Biomaterials 30, 6333 (2009)
- [3] R. Pucek, J. Tuček, M. Kilianová, A. Panáček, L. Kvítek, J. Filip, M. Kolář, K. Tománková, R. Zbořil: Biomaterials 32, 4704 (2011)

1P14 PŘÍPRAVA NANOČÁSTIC STŘÍBRA REDUKCÍ BROMIDU STŘÍBRNÉHO

Petr Suchomel¹, Libor Kvítek¹, Aleš Panáček¹,
Robert Pucek¹

¹Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů a Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého, Tr. 17. listopadu 12, 77146 Olomouc

Nanočástice stříbra zaujímají díky svému obrovskému aplikačnímu potenciálu významné místo na poli výzkumu kovových nanomateriálů. Jejich fyzikálně-chemické vlastnosti, mezi něž patří především vlastnosti optické, katalytické a biologické, přímo souvisí s jejich malým rozměrem a tedy velkým povrchem. Proto je jedním z předmětů studia právě vývoj metod přípravy nanočástic stříbra s definovanou velikostí, případně morfologií. Nejčastěji používanou technikou přípravy nanočástic stříbra je kondenzační metoda založená na redukci rozpustných stříbrných solí, jako jsou AgNO₃, [Ag(NH₃)₂]⁺, apod. [1,2]. Alternativní metoda spočívá v redukci nerozpustných stříbrných solí, které se nacházejí v koloidní disperzi, silným redukčním činidlem. Právě touto metodou přípravy se zabývá prezentovaná práce.

Nanočástice stříbra byly připraveny dvou-
stupňovou metodou. V první fázi byla připravena koloidní disperze částic bromidu stříbrného reakcí AgNO₃ s KBr v různých koncentračních poměrech, jimiž byla řízena výsledná velikost částic. Takto připravené částice byly následně redukovány na nanočástice stříbra přidávkem tetrahydridoboritanu sodného do reakčního systému. Byl studován vliv koncentračního poměru bromidu draselného a dusičnanu stříbrného na velikost vznikajících částic AgBr a

následně vliv velikosti částic AgBr na velikost nanočástic stříbra vznikajících jeho redukcí. Po nalezení nejlepšího koncentračního poměru z hlediska velikosti připravovaných nanočástic stříbra byl postup modifikován a byl prostudován vliv vybraných modifikátorů na velikost částic bromidu stříbrného a stříbra.

Tato práce byla podpořena projekty OP VaVpI reg. číslo CZ.1.05/2.1.00/03.0058, MŠMT ČR MSM6198959218 a MSM6198959223, GAČR GAP304/10/1316 a vnitřním grantem UP Olomouc PrF_2011_020.

- [1] Zaheer Khan, Shael Ahmed Al-Thabaiti, Abdullah Yousif Obaid, A.O. Al-Youbi: Colloid Surf. B-Biointerfaces 82, 513–517 (2011)
- [2] Aleš Panáček, Libor Kvítek, Robert Pucek, Milan Kolář, Renata Večeřová, Naděžda Pizúrová, Virender K. Sharma, Taťjana Nevěčná, Radek Zbořil: J. Phys. Chem. B 110, 16248–16253 (2006)

1P15 SRÁŽENÍ A STABILIZACE NANOČÁSTIC SULFIDU ZINEČNATÉHO NA MONTMORILLONITU, MOŽNOSTI VYUŽITÍ PRO FOTOREDUKCI OXIDU UHĹÍČITÉHO

Petr Praus¹, Richard Dvorský¹, Ondřej Kozák¹,
Kamila Kočí¹, Stanislav Bartusek¹

VŠB-Technická univerzita Ostrava, 17. listopadu 15,
708 33 Ostrava, petr.praus@vsb.cz

Nanočástice ZnS byly připraveny srážením Zn²⁺ (octan zinečnatý) sulfidem sodným v prostředí kationaktivního tenzidu – cetyltrimethylamonia (CTA). S rostoucí koncentrací CTA se poloměr nanočástic zmenšoval až na hodnotu 2,5 nm, kdy bylo dosaženo kritické micelární koncentrace (1 mmol l⁻¹). Za těchto podmínek se tvořily stabilní micely ZnS&CTA s hydrodynamickým poloměrem R(h) = 8 nm a zeta potenciálem 37 mV. Velikost nanočástic byla vypočtena z hodnot energií zakázaného pásu, které byly stanoveny z absorpčních spekter koloidních disperzí ZnS&CTA pomocí Taucovy rovnice [1].

Micely ZnS&CTA v koloidní disperzi o koncentraci 4 mmol l⁻¹ CTA byly zachyceny na povrchu fylosilikátu montmorillonitu (MMT) za tvorby stabilních aglomerátů ZnS-MMT-CTA o R(h) = 153 nm. Tyto aglomeráty byly odfiltrovány, vysušeny a studovány metodami RTG difrakce, skenovací a transmisní elektronové mikroskopie a dynamického rozptylu světla. Nanočástice ZnS s romboedrickou strukturou byly rovnoměrně rozprostřeny na

vnějším povrchu MMT, medián poloměru nanočástic činil 2 nm.

Aglomeráty (nanokompozity) ZnS-MMT-CTA byly testovány pro fotoredukci CO_2 , který byl jímán do roztoku $0,2 \text{ mol l}^{-1}$ NaOH a za stálého míchání ozařován Hg výbojkou po dobu 24 hod. V plynné fázi byly nalezeny vodík, methan a oxid uhelnatý. V kapalně fázi byl nalezen methanol. Výtěžky těchto produktů byly 5-6x vyšší než při použití TiO_2 (Evonik).

Autoři děkují Grantové agentuře České republiky za finanční podporu projektu P107/11/1918.

[1] Kozák O., Praus P., Kočí K., Klementová M.: Preparation and characterization of ZnS nanoparticles deposited on montmorillonite. *J. Colloid Interface Sci.* 352 (2010) 244-251.

1P16 PŘÍPRAVA NANOAGREGÁTŮ nC_{60} Z KOLOIDNÍ NANODISPERZE (C_{60} +TOLUEN)- H_2O

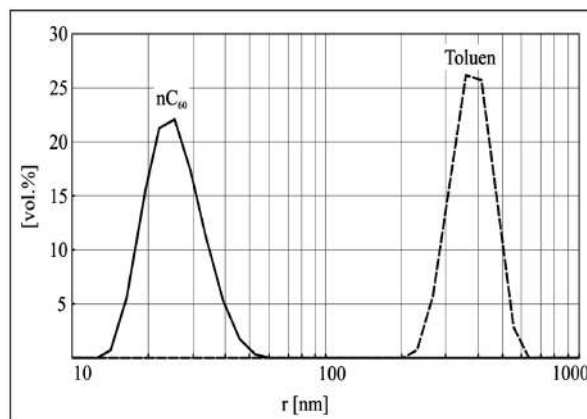
Richard Dvorský¹, Jana Trojčková¹, Petr Praus²

¹Institut Fyziky VŠB-Technická Univerzita Ostrava,
17.listopadu 15, Ostrava-Poruba, 708 33,
richard.dvorsky@vsb.cz

²Katedra Analytické Chemie VŠB-Technická Univerzita
Ostrava, 17.listopadu 15, Ostrava-Poruba, 708 33

Vodní mikroemulze hydrofóbních organických kapalin bývá v některých případech využívána v režimu „olejové flotace“ pro separaci jemných mikročástic z vodní disperze. Mechanismus separace je v tomto případě založen na významném rozdílu ve smáčení částic vodou a organickou kapalinou.

Jako inverzní úlohu lze proces aplikovat na molekulární úrovni, kdy rozdíl smáčivosti je nahrazen rozdílem rozpustnosti příslušných molekul v obou složkách mikroemulze. Elementární nanočástice - makromolekuly C_{60} jsou na rozdíl od vody relativně dobře rozpustné v toluenu - 2,8 mg/ml [1]. Metodou „inverzní emulgace“ lze připravit nanoagregáty nC_{60} , stabilní ve vodní disperzi.



Obr. 1 DLS analýza rozdělení velikosti nanoagregátů nC_{60} připravených z emulzních mikrokapek roztoku C_{60} v toluénu (modus 381,6 nm). Nanoagregáty nC_{60} vykazují ve statistickém rozdělení velikosti modus 26,1 nm a vytvářejí na rozdíl od molekul C_{60} stabilní vodní disperzi.

Molekulární roztok C_{60} v toluenu je po smísení s vodou intenzivní turbulencí v ultrazvuku převeden do stavu mikroemulze s maximálním podílem kapek o poloměru 381,6 nm (viz Obr.1). V kontinuální turbulenci je emulze trvale udržována na teplotě $50 \text{ }^\circ\text{C}$ s odsáváním par toluenu až do jeho úplného odpaření. Vzniklá stabilní vodní disperze obsahuje maximální podíl nanoagregátů nC_{60} o poloměru 26,1 nm (viz Obr.1). Jejich velikost odpovídá obsahu elementárních molekul C_{60} v mikrokapce emulze a je závislá na koncentraci C_{60} v původním toluenu.

Práce byla provedena na VŠB-Technické Univerzitě Ostrava a byla financována Grantovou Agenturou České Republiky GAČR v rámci projektu P102/11/0675 a Regionální materiálově technologické výzkumné centrum RMVC v rámci projektu CZ.1.05/2.1.00/01.0040.

[1] Ruoff, R. S., Tse, D. S.: Solubility of C_{60} in a variety of solvents. *J. Phys. Chem.* [online]. 1993, vol. 93, is. 13 [cit. 2009-03-16], s. 3379-3383.

1P17 CONDUCTING PROPERTIES OF EXTENDED VIologen MOLECULES

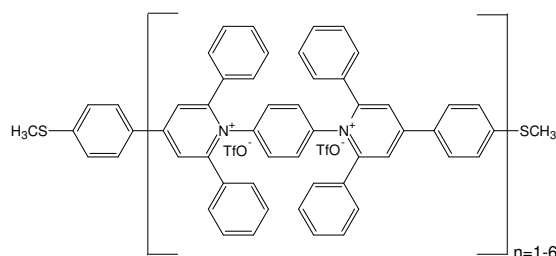
Magdaléna Hromadová¹, Viliam Koliwoška¹,
Miroslav Gál¹, Lubomír Pospíšil^{1,2}, Michal
Valášek²

¹J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry ASCR,
v.v.i., Dolejškova 3, 18223 Prague, Czech Republic
hromadom@jh-inst.cas.cz

²Institute of Organic Chemistry and Biochemistry of
ASCR, v.v.i., Flemingovo n. 2, 16610 Prague, Czech
Republic

Facile electron transfer in molecules with one dimension greatly exceeding the other two (molecular wires) is essential in the development of new molecular electronic devices as these molecules can serve as organic conductors.

A series of extended viologen molecules with $n = 1$ to 6 repeating units (see Scheme) has been studied by electrochemical and spectroscopic methods. The electron transfer in the shortest homologue is due to the reduction of two identical communicating pyridinium moieties leading to a full charge delocalization, whereas the electron transfer in molecules with $n \geq 2$ is due to the reduction of initially non-communicating centers. This was confirmed by digital simulation of the cyclic voltammograms.¹



The measurements of the conductivities of individual metal–molecule–metal junctions were done using Tao's approach.² Original wires were chemically modified to dithiols, which were then chemisorbed onto the gold substrate. Current–distance curves were measured by scanning tunneling spectroscopy and the conductance histograms were constructed. The single molecule conductance values decay exponentially with increasing length of the molecule and change from 5.1 nS to 3.1 nS. Interestingly, the attenuation parameter β for these compounds is much smaller than for any other σ and π -containing systems known to us.

A Grant Agency of the Academy of Sciences of the Czech Republic (IAA400400802), Grant Agency of the Czech Republic (GACR 203/08/1157, 203/09/0705)

and Ministry of Education (MEB041006) are greatly acknowledged for the financial support.

[1] V. Koliwoška, M. Gál, L. Pospíšil, M. Valášek, M. Hromadová: Phys. Chem. Chem. Phys., 13 (2011) 11422.

[2] B. Xu, N.J. Tao: Science, 301 (2003) 1221.

1P18 EPR SPIN TRAPPING TECHNIQUE – A POWERFUL TOOL IN THE INVESTIGATIONS OF PHOTOINDUCED PROCESSES

Vlasta Brezová¹, Zuzana Barbieriková¹, Maroš
Bella², Viktor Milata², Andrej Staško¹

¹Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics

²Institute of Organic Chemistry, Catalysis and
Petrochemistry, Faculty of Chemical and Food
Technology, Slovak University of Technology in
Bratislava, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava,
Slovak Republic, vlasta.brezova@stuba.sk

Electron paramagnetic resonance (EPR) spin trapping technique represents the most suitable indirect method for the investigation of reactive paramagnetic intermediates, as it can distinguish and quantify different reactive species generated in photoinduced processes. The diamagnetic spin trap agent reacts with the short living paramagnetic intermediate producing a more stable nitroxide radical, i.e., spin adduct. The analysis of hyperfine coupling constants in the EPR spectra of spin adduct allow to identify the trapped radical [1]. The irradiation of heterocyclic compounds under air often results in the activation of molecular oxygen associated with reactive oxygen species ($\cdot\text{OH}$, $\text{O}_2^{\cdot-}$, $\cdot\text{O}_2\text{H}$) formation, and the choice of a suitable spin trap remains essential for their successful identification. *N*-oxide and nitron spin traps were used in the identification of hydroxyl radical generation, as well as other oxygen-, nitrogen- and sulfur-centered radicals, but the information on structure of carbon-centered radicals trapped with these agents are limited, and the application of nitroso spin traps is recommended [2, 3].

Recently, we evidenced the generation of oxygen- and carbon-centered radical intermediates upon irradiation of synthesized substituted selenadiazoloquinolones, 2,1,3-benzoselenadiazoles (Fig. 1) and 2,1,3-benzothiadiazoles using various *N*-oxide and nitroso spin trapping agents and the results obtained will be presented.

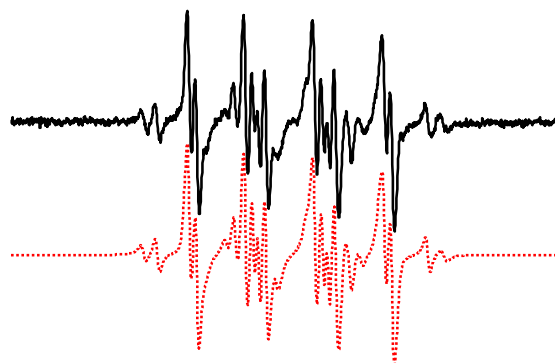


Fig. 1 Experimental (solid line) and simulated (dotted line) EPR spectra obtained upon continuous photoexcitation ($\lambda=365$ nm) of air saturated dimethylsulfoxide solutions of 5-nitro-2,1,3-benzoselenadiazole in the presence of 5,5-dimethyl-1-pyrroline *N*-oxide spin trap (magnetic field sweep 8 mT)

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-0339-10 and by Scientific Grant Agency of the Slovak Republic (VEGA Projects 1/0018/09 and 1/0660/11).

- [1] M. Kohn: *J. Clin. Biochem. Nutr.* 47, 1 (2010).
 [2] I. Spasojević: *J. Med. Biochem.* 29, 175 (2010).
 [3] C. L. Hawkins, P. E. Morgan, M. J. Davies: *Free Radic. Biol. Med.* 46, 965 (2009).

1P19 ŠTÚDIUM INFRAČERVENÝCH SPEKTIER JEDNODUCHÝCH ZLÚČENÍN POMOCOU EXPERIMENTÁLNYCH MERANÍ A TEORETICKÝCH VÝPOČTOV

Daniel Zich¹, Ivan Černušák¹, Marián Matejdes¹,
Ignác Bugár², Marian Janek^{1,3}

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

²Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 812 19
Bratislava,

³Slovenská akadémia vied, technologicky inštitut,
Dúbravská cesta 9, 845 13 Bratislava

daniel.zich@gmail.com

Cieľom práce bolo porovnanie teoretických a experimentálnych spektier vybraných plynných molekúl v d'alekej IČ oblasti ($10-120$ cm^{-1}). Ako modelové molekuly boli použité plyny H_2O , N_2O a CO_2 . Predpokladom úspešnej identifikácie pásov bolo získanie čo najmenších rozdielov v polohe maxima absorpčných spektier pri porovnaní ich teoretických a experimentálnych závislostí. Nutným predpokladom pre porovnanie experimentálnych spektier bolo testovanie metód výpočtu poskytujúcich modelové spektrá, ktoré dostatočne korelujú s experimentálnymi

spektrami. IČ spektrá boli zároveň porovnávané s údajmi publikovanými v literatúre.

Pri výpočtoch spektier bolo potrebné vyšetrenie voľby optimálnej metódy a bázy atómových orbitálov. Vzhľadom na veľkosť uvažovaných klastrov molekúl sme výpočty realizovali metódou DFT (density functional theory) programom Gaussian 03 [1]. V prvej etape prác sme použili bázy 3-21G, 6-31G*, 6-311G** a funkcionál B3LYP na optimalizáciu geometrie ako aj na harmonickú vibračnú analýzu (IČ spektrum). Po vyhodnotení B3LYP výsledkov sme doplnili výpočty o kvalitnejšiu kombináciu: funkcionál ω B97XD v spojení s bázami cc-pvdz, cc-pvtz. IČ spektrá sa počítali napr. pre nasledovné klastre: H_2O , $(\text{H}_2\text{O})_2$, $(\text{H}_2\text{O})_3$, $(\text{H}_2\text{O})_4$, $(\text{H}_2\text{O})_5$, $(\text{H}_2\text{O})_6$, $(\text{H}_2\text{O})_7$, $(\text{H}_2\text{O})_8$.

Pre porovnanie modelových spektier s experimentom bolo potrebné stanovenie spektier vybraných plynov v d'alekej IČ, (THz) oblasti. Spektrá namerané pomocou „THz time domain spectroscopy“ boli porovnané s výpočtami a spektrami publikovanými v literatúre uvádzajúcej výsledky modelových plynov [2,3]. Zistené frekvencie absorpčných pásov získané experimentálne a výpočtom budú využité pri ďalšom štúdiu modifikovaných hybridných materiálov na báze ílových minerálov s molekulami obsahujúcimi študované väzby.

Tato práca vznikla za podpory grantov UK 309/2010, UK 338/2011, APVV-0491-07, VEGA 1/4457/07 a 1/0428/09

- [1] M. J. Frisch et al., Gaussian 03, (Revision D.01). Gaussian Inc., Pittsburg PA, 2004.
 [2] D. F. Plusquellic, T. M. Korter, G. T. Fraser, R. J. Lavrich, E. C. Benck, C. R. Bucher and J. Domench: *World Scientific* 13, 385 (2003).
 [3] V.B. Podobedov, D.F. Plusquellic, G.T. Fraser: *Journal of Quantitative Spectroscopy & radiative transfer* 91, 287 (2004).

1P20 PROCESSES IN CONDENSED PHASE AND NON-ARRHENIAN KINETICS

Peter Šimon¹

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

Concept of the single-step approximation in condensed state kinetics is presented and its main attributes are analyzed [1]. Isoconversional methods based on non-Arrhenian temperature

functions are introduced [2]. Induction periods and their relation with thermooxidative material stability are outlined [3]. Oxidation onset temperature, oxidation induction time, protection factor, antioxidant efficiency, synergism of antioxidants, residual stability and equivalence between various stability tests are presented as material stability criteria [3].

The financial support from the Slovak Scientific Grant Agency, grant No. VEGA 1/0660/09, is gratefully acknowledged..

- [1] P. Šimon: J.Therm.Anal.Calorim. 88 (2007) 709-715.
 [2] P. Šimon: J.Therm.Anal.Calorim. 79 (2005) 703-708.
 [3] P. Šimon: J.Therm.Anal.Calorim 84 (2006) 263-270.

1P21

DIELEKTRICKÉ VLASTNOSTI VODÍKOVÝCH SENZORŮ NA BÁZI STRUKTUR TYPU MOS

Fedor Šrobár, Olga Procházková

Ústav fotoniky a elektroniky, Akademie věd České republiky, Chaberská 57,182 51 Praha, srobar@ufe.cz

V souvislosti s možným využitím vodíku jako ekologicky nezávadného zdroje energie vzniká potřeba citlivých, jednoduchých a spolehlivých senzorů tohoto výbušného plynu. Důležitá kategorie těchto prvků je založena na snížení potenciálové bariéry na rozhraní Pd nebo Pt elektrody a izolantu ve strukturách typu kov/oxid/polovodič (MOS) [1]. V důsledku katalytických vlastností kovu dochází k disociaci molekul H_2 při jejich adsorpci; atomy vodíku pak difundují přes kov a vytvářejí adsorbovanou vrstvu na vnitřním rozhraní s oxidem. V důsledku rozdílných elektronových afinit kovu a oxidu dochází k polarizaci atomů H a tím ke vzniku dipólové vrstvy, jejíž potenciál ovlivňuje výšku bariéry (např. Schottkyho typu) na rozhraní kov/oxid.

V návaznosti na naši práci [2] budou analyzovány nelineární dielektrické vlastnosti této dipólové vrstvy pro případ struktur Pt/SiO₂/Si a Pt/(In₂O₃+P₂O₅)/InP. Energetické stavy adsorbovaných atomů H jsou reprezentovány pomocí asymetrického potenciálového profilu se dvěma lokálními minimami. Na základě nalezené závislosti mezi vnějším polem E a polarizací P lze odvodit výrazy pro dielektrické permeability vyšších řádů a sledovat nelineární chování senzorů při aplikaci vnějšího napětí s

harmonickou složkou. Výsledky této studie mohou přispět k lepšímu pochopení funkce senzorů a k návrhu diagnostických experimentů pro stanovení vlastností těchto prvků.

Autoři děkují za finanční podporu Grantové agentury České republiky (projekt č. 102/09/1037).

- [1] I. Lundström, L.-G. Petersson: J. Vac. Sci. Technol. A14 (1996) 1539.
 [2] F. Šrobár, O. Procházková: v Proc. 8th Int. Conf. on Advanced Semiconductor Devices and Microsystems, Smolenice, Slovakia 2010, p. 275.

1P22

MOŽNOSTI VYUŽITIA 2D KVAPALINOVEJ CHROMATOGRAFIE NA CHARAKTERIZÁCIU HUMÍNOVÝCH LÁTOK

Góra R.¹, Hutta M.¹, Rohárik P.¹, Masaryková N.¹

¹*Katedra analytickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Mlynská dolina CH-2, 842 15, Bratislava, Slovakia, e-mail: gora@fns.uniba.sk*

Pod pojmom mutlidimenzionálna separácia predstavujeme použitie kombinácie rozdielnych separačných mechanizmov na analýzu látok v komplexných maticiach a predstavuje prínos hlavne z hľadiska možnosti dosiahnutia vyššej pikovej kapacity vzhľadom na 2D separačný priestor.

Humínové látky (HL) patria medzi najrozšírenejšie enviromakromolekuly a majú priamy vplyv na najrôznejšie procesy a deje odohrávajúce sa v životnom prostredí. Patria medzi zlúčeniny, ktoré doteraz nemajú presnú definíciu ako chemické individua, sú tzv. neurčito definované chemické systémy. Charakteristickým pre túto skupinu látok je nevýrazný, difúzny analytický signál, neposkytujúci presne definované fyzikálno-chemické údaje jedinou číselnou hodnotou, ale distribučnou funkciou a priemernou hodnotou maxima signálu. Výrazný analytický signál poskytujú HL iba pri zjednodušujúcom pohľade, zameranom napr. na ich elementárne chemické zloženie. Štruktúrna variabilita a vlastnosti HL majú za následok veľmi rôznorodé prejavy v správaní sa za rôznych podmienok (napr. silná schopnosť agregovať a disagregovať, vytvárať supramolekulové štruktúry). Táto komplexnosť vyžaduje pri ich výskume okrem potreby vyvíjať nové techniky aj potrebu osvojiť si nové pohľady a prístupy pri interpretácii výsledkov.

Z uvedeného vyplýva, že je stále potrebné vyvíjať nové separačné metódy a techniky na analýzu a charakterizáciu týchto látok. K riešeniu podobných zložitých problémov môže napomôcť aplikácia nových postupov, ktoré poukazujú na možnosti kombinácie spájania dvoch alebo viacerých chromatografických alebo separačných metód pracujúcich na odlišných princípoch (napr. SEC-HPLC, RP-HPLC-SEC, ITP-CZE-HPLC) [1] a taktiež využitie neobvyklých, doteraz menej používaných postupov v chromatografických metódach (skoková gradientová elúcia, voľba netradičného organického modifikátora mobilnej fázy – DMF a pod.) [2,3].

Táto práca vznikla za podpory grantov VEGA 1/0870/09, VEGA 1/0329/10, APVV-0595-07, VVCE-0070-07.

- [1] R. Góra, M. Hutta, Rohárik P., Characterization and Analysis of Soil Humic Acids by Off-line Combination of Wide-Pore HPLC with Narrow Bore Column Reverse Phase HPLC with Fluorescence Detection, *J. Chromatogr. A.*, in press.
- [2] M. Hutta, R. Góra, *J. Chromatogr. A*, 67, 1012 (2003).
- [3] R. Góra, M. Hutta, *J. Chromatogr. A.*, 39, 1084 (2005).

1P23 STANOVENIE D-SORBITOLU BIOSENZOROM PRIPRAVENÝM POMOCOUBIONANOKOMPOZITU

Jana Šefčovičová¹, Jaroslav Filip¹, Peter Gemeiner¹, Ján Tkáč¹

¹*Oddelenie glykobiotechnológie, Chemický ústav, Centrum glykomiky, SAV, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovenská republika*

V dnešnej dobe sa na prípravu senzorov a biosenzorov čoraz častejšie používajú rôzne formy nanoštruktúr, napr. mezoporézny uhlík, nanoporézne kovy alebo grafén, ale najviac používané sú uhlíkové nanorúrky (CNT) [1]. CNT majú výborné redoxné vlastnosti vďaka prítomnosti defektov a hrán [2]. Čisté CNT je náročné dispergovať v organických alebo vodných rozpúšťadlách; disperzné činidlo by malo poskytnúť vysokú biokompatibilitu a byť schopné zaviesť funkčné skupiny, ktoré by bolo možné využiť pri modifikácii CNT. Na tento účel môže byť veľmi účinne použitá kyselina hyalurónová (HA), súdiac z výbornej vodivosti nanokompozitu a pozoruhodnej schopnosti dispergovať CNT. Cieľom tejto práce bolo

prípraviť a charakterizovať bionanokompozit pozostávajúci z uhlíkových nanorúrok (CNT) dispergovaných v kyseline hyalurónovej (HA) a toluidínovej modrej (TB), pričom výkon tohto rozhrania na detekciu NADH bol testovaný v dvoch operačných systémoch – vsádzkovom a prietokovom. HA/CNT/TB bionanokompozit bol následne použitý na prípravu biosenzora na stanovenie D-sorbitolu, ktorý sa vyznačoval veľmi dobrou operačnou stabilitou, vysokou citlivosťou, nízkym detekčným limitom a krátkym časom odpovede. Tento biosenzor sa otestoval off-line monitorovaním D-sorbitol pri jeho konverzii na L-sorbózu pomocou buniek *Gluconobacter oxydans*, dosiahnuté výsledky boli vo veľmi dobrej zhode s referenčnou HPLC analýzou [3].

Táto práca vznikla za podpory EEA grantu SAV-FM-EHP-2008-04-04. Príspevok bol vytvorený realizáciou projektu Centrum pre Materiály, vrstvy a systémy pre Aplikácie a Chemické procesy v extrémnych podmienkach na základe podpory operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja.

- [1] Ahammad, A. J. S., Lee, J. J., Rahman, M. A., *Sensors* 2009, 9, 2289-2319
- [2] Banks, C. E., Compton, R. G., *Analyst* 2005, 130, 1232-1239.
- [3] Šefčovičová, J., Filip, J., Tomčík, P., Gemeiner, P., Bučko, M., Magdolen, P., Tkáč, J., *Microchimica Acta* 2011, in press, DOI: 10.1007/s00604-011-0641-0.

1P24
ELECTROCHEMICAL PRETREATMENT
OF CARBON FIBER MICROELECTRODE
BASED ON SINUSOIDAL-WAVE
POTENTIAL CYCLING AND ITS
APPLICATION TO AMPEROMETRIC
SENSING

Petr Jakubec¹, Jan Hrbac¹, David Jirovsky²,
 Daniel Riman¹, Vladimír Halouzka¹, Zdenka
 Bartosova², Vlastimil Masek³, Peter Mojzes⁴, Jan
 Vacek⁵

¹Department of Physical Chemistry and ²Department
 of Analytical Chemistry, Palacky University, Faculty
 of Science, tr. 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc,
 Czech Republic,

³Department of Pharmacology, Faculty of Medicine
 and Dentistry, Palacký University, Hněvotínská 3, 775
 15 Olomouc, Czech Republic,

⁴Institute of Physics, Faculty of Mathematics and
 Physics, Charles University in Prague, Ke Karlovu 5,
 Prague 2, CZ 121 16, Czech Republic, and

⁵Department of Medical Chemistry and Biochemistry,
 Faculty of Medicine and Dentistry, Palacký
 University, Hněvotínská 3, 775 15 Olomouc, Czech
 Republic

The use of carbon fiber microelectrodes (CFEs) belongs to most powerful analytical approaches suitable for the electrochemical real-time sensing in microenvironments. Their unique properties as geometric dimensions and especially fast electrochemical response make them suitable for the determination of selected bioactive compounds, e.g. neuroactive substances e.g. dopamine, epinephrine and/or small molecules, namely nitric oxide [1,2]. However, as the surface of CFEs cannot be renewed by mechanical polishing which is the main method of preparing conventional electrodes, chemical treatment, laser ablation, heat pretreatment and electrochemical conditioning are the only ways to achieve reproducible state of surface of these electrodes [3]. Of the above, electrochemical pretreatment is preferred due to its reproducibility, efficiency and speed. In this study we demonstrate the electrochemical pretreatment of CFEs using a specifically designed fast-scan potentiostat. The pretreatment procedure is based on the sinusoidal-wave potential cycling of CFEs prior to amperometric analysis. The surface modification and morphology of CFEs after pretreatment was studied using Raman spectroscopy and scanning electron microscopy. The pretreated CFEs were tested for sensing of dopamine and nitric oxide by constant current

amperometry at 830 mV vs. Ag/AgCl, respectively.

This work was supported by Student Project PrF_2011_020 of Palacky University.

[1] Lowinsohn, D., Bertotti, M., 2006. *Quim. Nova.* 29, 1318–1325.

[2] Wilson, G.S., Gifford, R., 2005. *Biosens. Bioelectron.* 20, 2388–2403.

[3] Feng, J.X., Brazell, M., Renner, K., Kasser, R., Adams, R.N., 1987. *Anal. Chem.* 59, 1863–1867.

1P25
ANALÝZA VZORIEK ŽIVOTNÉHO
PROSTREDIA AFINITNOU
CHROMATOGRAFIOU
NA IMOBILIZOVANÝCH IÓNOCH KOVU

Radoslav Halko

*Katedra analytickej chémie, Prírodovedecká fakulta,
 Univerzita Komenského, Mlynská dolina, CH-2, 842
 15 Bratislava, Slovensko, halko@fns.uniba.sk*

Princíp afinitnej chromatografie na imobilizovaných iónoch kovu (IMAC) je založený na špecifických interakciách stanovovanej látky alebo jej špecifických interakčných miest (funkčne analytických skupín) s iónmi kovu naviazanými na nepohyblivú (stacionárnu) fázu. Toto vzájomné pôsobenie medzi naviazanými iónmi kovu a povrchom separovanej látky je využité na adsorpciu a po malej zmene separačných podmienok na následnú desorpciu látky z nepohyblivej fázy, t.j. má reverzibilný charakter.

Prvé teoretické základy IMAC metódy položil už v roku 1961 Helfferich, ktorý vo svojej práci popísal separáciu malých molekúl na princípe ligandovej výmeny [1]. V roku 1975 Porath a kol. vo svojej práci [2] úspešne popísali použitie imobilizovaných dvojmocných katiónov zinku a medi na frakcionovanie proteínov nachádzajúcich sa v ľudskom krvnom sére, na základe ich rozdielnej afinity k týmto katiónom. IMAC metóda si odvtedy získala veľkú popularitu hlavne v biochémii pri purifikácii proteínov z komplexných biologických matríc.

V súčasnosti si IMAC metóda, okrem početných aplikácií v biochémii a biotechnológii, postupne našla uplatnenie aj pri separácii a frakcionácii látok, napríklad organických ligandov resp. humínových látok, zo vzoriek životného prostredia (voda, pôda, sedimenty) [3].

Táto práca vznikla za finančnej podpory grantov MŠ SR VEGA 1/0329/10, APVV-0595-07 a VVCE-0070-07.

- [1] Helfferich F.: Nature 189, 1001 (1961).
 [2] Porath J., Carlsson J., Olsson I., Belfrage G.: Nature 258, 598 (1975).
 [3] Halko R., Neuročný T., Hutta M.: Pol. J. Soil Sci. 42, 149 (2009).

1P26 MODELOVANIE A INTERPRETÁCIA NANOTRIBOLÓGIE POMOCOU DFT

Robert Turanský, Ján Brndiar, Ivan Štich

Center for Computational Materials Science,
 Fyzikálny ústav SAV, 84511 Bratislava

V prvej časti si predstavíme niektoré aspekty nanotribológie (Tomlinsonov model, teplotná závislosť, závislosť na rýchlosti, superlubricita atď). V druhej časti popíšeme experimentálne výsledky z manipulácie nanočastíc antimónu na grafitovom povrchu (HOPG). Na základe našich

numerických simulácií (DFT simulácie so zahrnutím van der Waalovej interakcie) sa snažíme identifikovať mechanizmus, ktorý spôsobuje pozorované trecie bi-duality v experimentoch (experimentálne sú pozorované tri rôzne závislosti trenia od styčnej plochy a) bez trenia, b) s normálnym trením, a c) s vysokým trením).

Získané výsledky poskytujú porozumenie správania vo všetkých vetvách trenia, a navyše tiež dávajú, po prvý krát, realistický pohľad na molekulárny pohyb týchto častíc pri posúvaní.

Táto práca bola podporená grantom FANAS NANOPARMA.

- [1] J. Brndiar, R. Turanský, et al., Nanotechnology 22, 085704 (2011).
 [2] J. Brndiar, R. Turanský, et al., Phys. Rev. B, to be published.

PREDNÁŠKY - SEKCIA 2: ANORGANICKÁ A MATERIÁLOVÁ CHÉMIA

2P01 PHASES OF K_2TaF_7 AND K_3TaF_8

Miroslav Boča¹, Blanka Kubíková¹, František Šimko¹, Iveta Macková¹, Ján Moncol²

¹Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences (Slovakia)

²Institute of Inorganic Chemistry, Slovak University of Technology, Bratislava (Slovakia)

A relatively simple compound, K_2TaF_7 , undergoes different non-standard solid-solid or solid-liquid transformations. The first one is from monoclinic α - K_2TaF_7 phase ($P2_{1/c}$) to orthorhombic β - K_2TaF_7 phase (P_{nma}) at 509 K. The second transformation was observed by DSC at 976 K and confirmed by powder neutron diffractions [1]. Structure of β - K_2TaF_7 phase was optimized by energy minimization in the solid state using a plane-waves DFT computation based on synchrotron powder diffraction experiments at 993 K [2].

Mixing of melted KF and K_2TaF_7 provides the compound of the composition as K_3TaF_8

suggesting the presence of the coordination polyhedron as $[TaF_8]^{3-}$. Based on structural investigation determined from laboratory powder diffraction data by the simulated annealing method and refined by total energy minimization it was found out that the crystal structure in the solid state is built from discrete potassium cations, fluoride anions and monocapped trigonal-prismatic $[TaF_7]^{2-}$ ions [4].

By combination of single crystal analysis, XRD, and XPS it was suggested that reported cubic phase K_3TaOF_6 is in fact $K_3TaO_2F_4$ and reported tetragonal phase $K_3TaO_2F_4$ is in fact $K_3[TaO_4] \cdot K_3[TaF_4O_2]$. The compound $K_3[TaO_4] \cdot K_3[TaF_4O_2]$ crystallise in tetragonal system with cell parameters $a = 6.2220(3)$ Å and $c = 8.7625(34)$ Å, respectively. The crystal structure consists of two anions, $[TaO_4]^{3-}$ and $[TaF_4O_2]^{3-}$ and cations K^+ .

This contribution/publication is the result of the project implementation: Centre for materials, layers and systems for applications and chemical processes under extreme conditions – Stage II supported by the Research & Development Operational Programme funded by the ERDF.

- [1] Kosa, L., Macková, I., Proks, I., Pritula, O., Smrčok, L., Boča, M. and Rundlöf, H. (2008): Phase transitions of K_2TaF_7 within 680 – 800 oC. Central European Journal of Chemistry 6, 27-32.
 [2] Smrčok, L., Brunelli, M., Boca, M. and Kucharik,

M. (2008): Structure of K₂TaF₇ at 993 K: the combined use of synchrotron powder data and solid-state DFT calculations. *Journal of Applied Crystallography* 41, 634-636.

- [3] Smrcok, L., Cerný, R., Boca, M., Macková, I. and Kubíková, B. (2010): K₃TaF₈ from laboratory X-ray powder data. *Acta Crystallographica Section C*, C66, i16–i18.

2P02

ODOLNOSŤ ZIRKÓNIOVÝCH ZLIATIN V ROZTAVENÝCH FLUORIDOVÝCH SOLIACH

Peter Barborík¹, Miroslav Boča¹

¹ Ústav anorganickej chémie SAV, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, uachpeba@savba.sk

Zirkóniové zliatiny boli vyvinuté pre použitie ako materiály pokrytia jadrového paliva (ako aj pre iné časti jadrového reaktora) v roku 1950 [1, 2]. Zirkónium bolo zvolené pre aplikáciu vo vodou chladených jadrových reaktoroch z dôvodu nízkeho účinného zachytu tepelných neutrónov, priaznivých mechanických vlastností a dobrej odolnosti voči korózii pri vysokej teplote vody [1, 3].

Doteraz sa sledovala korózna odolnosť zliatin na báze zirkónia len vo vode s rôznymi prímiesami na potlačanie korózie. Cieľom tejto práce bolo zistiť koróznú odolnosť čistého zirkónia a dvoch zirkóniových zliatin, Zr₂ a Zr₁Nb v roztavenej fluoridovej soli obsahujúcej rôznu prídavok hexafluorozirkoničitanu draselného. Skúmala sa závislosť hmotnostného úbytku od zloženia soli a teploty.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. LPP-0344-09. Príspevok /publikácia/ bol/a vytvorený/á realizáciou projektu Centrum pre Materiály, vrstvy a systémy pre Aplikácie a Chemické procesy v extrémnych podmienkach – Etapa II na základe podpory operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja.

- [1] H.G. Rickover, Geiger L.D., Lustman B.: History of the development of zirconium alloys for use in nuclear reactors, US Report, Division of Naval Reactors, Washington, DC, TID-26740, March 1975.
- [2] D.E. Thomas, in: B. Lustman, F. Kerze (Eds.): *Metallurgy of Zirconium*, Vol. VIII-4, McGraw-Hill, National Nuclear Energy Series, New York, 1955 (Chapter 11, Pt. II).
- [3] Zaimovskii A.S., Nikulina A.V., Rezhnetnikov I.G.: *Zirconium Alloys for Nuclear Energy*, Energoatomizdat, Moscow, 1994 (in Russian).

2P03

HIGH PURITY InP LAYERS OF BOTH CONDUCTIVITY TYPES PREPARED BY EXPLOITING Pr ADDITION INTO THE LPE GROWTH MELT

Jiří Zavadil, Olga Procházková, Jan Grym, Karel Žďánský

Institute of Photonics and Electronics AS CR., Chaberská 57, 182 51 Praha 8-Kobylisy. CR, zavadil@ufe.cz

Rare-earth (RE) elements present in the growth from the liquid phase have purifying effect on III–V semiconductors due to REs high affinity towards chemical species of shallow impurities [1]. Removal of detrimental impurities is of vital importance in various applications such as nuclear particle detector structures [2] where high electron and hole drift velocities are needed. We report on the influence of Pr addition into the growth melt on the purity of InP layers prepared by liquid phase epitaxy (LPE). Low-temperature photoluminescence (PL) and capacitance-voltage measurements were employed to assess the quality of grown layers. The high purifying effect due to Pr addition and optimized conditions of LPE growth is documented by the impurity concentration decrease by three orders of magnitude, reaching the value of $1 \times 10^{-14} \text{ cm}^{-3}$. Low-temperature PL spectra confirmed the high quality and purity of grown layers enabling resolution of fine structure in excitonic band and to distinguish the band-acceptor transitions from donor-acceptor pair ones.

The addition of Pr into the growth melt enables to prepare thick and pure InP layers of both (*n* and *p*) electrical conductivity types. Thus promising material and structures, in the context of semiconductor radiation detection, can be prepared in this way.

The work was supported by the Czech Science Foundation project No. 102/09/1037.

- [1] Olga Procházková, Jiří Zavadil, Karel Žďánský: *Crystal Res. and Technol.* 36 (2001) 979-987.
- [2] Jan Grym, Olga Procházková, Jiří Zavadil, Karel Žďánský: *Material Science and Engineering B* 165 (2009) 94-97.

2P04**ŠTÚDIUM ŠTRUKTÚRY FLUORIDOVÝCH
SÚSTAV POMOCOU NMR
SPEKTROSKOPIE**

František Šimko¹, Aydar Rakhmatullin²,
Catherine Bessada²

¹Ústav Anorganickej Chémie SAV, Dúbravská cesta 9,
845 36 Bratislava, uachs@savba.sk

²Conditions Extremes et Materiaux: Haute
Temperature et Irradiation, CNRS, Orléans, France

V poslednom desaťročí sa výrazne vyvíjali nové analytické techniky, ktoré umožňujú identifikovať štruktúrne entity priamo *in-situ* aj v takých náročných systémoch ako sú fluoridové taveniny. Fluoridové taveniny majú široké využitie v priemysle, a to v mnohých aplikáciách, hlavne vo výrobe hliníka, alkalických kovov, kovov alkalických zemín, žiaruvzdorných kovov alebo transuránov, ale aj v tzv. „nekonvenčných“ aplikáciách, medzi ktoré patrí ich využitie v jadrovom priemysle alebo v teplo-transportných a akumuláčnych systémoch. Priemyselné využitie tavenín vychádza z ich priaznivých fyzikálno-chemických vlastností. Nevýhody použitia týchto látok v priemysle ako aj problémy ich jednoduchej štruktúrnej špecifikácie vychádzajú z ich vysokých bodov topenia, vysokej korozívnosti a citlivosti na vzdušný kyslík a vlhkosť. Doteraz sa na stanovenie chemickej podstaty fluoridových tavenín priamo v ich roztavenom stave využívali techniky vysokoteplotnej IČ a Ramanovej spektroskopie, vysokoteplotnej Rtg difrakcie, novšie je možné použiť aj vysokoteplotnú NMR spektroskopiu. Metóda je založená na opise štruktúry tavenín, pričom skúma lokálne prostredie meraného jadra. Podáva informácie o mikroskopickej štruktúre tavenín, o type častíc prítomných v tavenine, o priemernej koordinácii, alebo o charaktere jadier, ktoré ich obklopujú. Tiež poskytuje dynamický opis tavenín pomocou merania relaxačných časov. Opisom systémov v ich roztavenom stave posúva výskum do oblastí, ktoré sú neprístupné doteraz používaným nepriamym analytickým metódam.

Príspevok bol vytvorený realizáciou projektu Centrum pre Materiály, vrstvy a systémy pre Aplikácie a Chemické procesy v extrémnych podmienkach – Etapa II na základe podpory operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja, ako aj slovenskou grantovou agentúrou VEGA na základe zmluvy č. 2/0179/10.

2P05**ZLÚČENINY CHRÓMU
V NÍZKOTAVITEĽNÝCH
ELEKTROLYTOCH NA VÝROBU
HLINÍKA**

Vladimír Danielik¹, Pavel Fellner¹, Dáša
Šuleková¹

¹Oddelenie anorganickej technológie UACHTM,
Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU,
Radlinského 9, 812 37 Bratislava,
vladimir.danielik@stuba.sk

Oxid chromitý býva súčasťou konštrukčných materiálov pre elektrolyzéry. Mechanizmus a rýchlosť korózie takýchto materiálov sa môže skúmať aj určením koncentrácie častíc chrómu v roztavenom elektrolyte. V tomto článku predstavujeme výsledky získané pri výskume rozpustnosti oxidu chromitého v tavenine 41,67 mol. % NaF + 58,33 mol. % AlF₃ (KP = 1,4) pri 900 °C. Difúzny koeficient Cr(III) sa určil chronopotenciometricky a má hodnotu D(Cr(III)) = 5,28 × 10⁻⁵ cm² s⁻¹. Ak sa to taveniny pridajú oxidové anióny, na katóde sa chróm začne vylučovať simultánne s hliníkom a zdanlivý difúzny koeficient chrómu Cr(III) dosahuje hodnotu 7,74 × 10⁻³ cm² s⁻¹, čo je asi stokrát vyššia hodnota aká sa bežne dosahuje v taveninách [1, 2]. Tento fakt si vysvetľujeme tvorbou oxofluorokomplexov chrómu a hliníka. Rozpustnosť oxidu chromitého v študovanej tavenine pri 900 °C sa študovala dvomi metódami: chemickou analýzou zatuhnutých vzoriek a chronopotenciometriou. Zistilo sa, že hladina nasýtenia sa dosiahla po 17 hodinách, pričom koncentrácia chrómu bola 177 ppm, čo korešponduje hodnote 258 ppm Cr₂O₃.

Táto práca vznikla za podpory Slovenskej grantovej agentúry VEGA (VEGA 1/0588/11). Autori chcú vyjadriť poďakovanie aj fy. Alcoa Inc., USA za finančnú podporu.

[1] H.A. Laitinen, W.S. Ferguson, Anal. Chem. 29 (1957) 4

[2] Ju.K. Delimarskij, N.A. Pavlenko, Ukr. Chim. J. 35 (1969) 12

2P06**THE INFLUENCE OF LOCALIZED SURFACE PLASMONS ON THE PHOTOLUMINESCENCE PROPERTIES OF METAL-COATED InP**

Olga Procházková, Jiří Zavadil, Jan Grym, Martin Koštej

Institute of Photonics and Electronics AS CR, Chaberská 57, 182 51 Praha 8-Kobylisy, CR, olgap@ufe.cz

We report on the influence of Pr, Er, Au and Pd nanolayers (NLs) on the luminescence properties of InP. Metallic NLs were prepared by evaporation of pure metals under high vacuum onto InP substrates. The effect of evaporated Au and RE NLs was compared with that of NLs deposited in the form of Au or Pd nanoparticles (NPs). Metal nanoparticles with the diameters of 7 to 10 nm, obtained by the reverse micelle technique and dispersed in isooctane solution, were electrophoretically deposited onto InP substrates [1, 2].

Low-temperature photoluminescence (PL) spectra of InP substrates and those covered with NLs deposited by various techniques were investigated. It has been shown that the presence of evaporated metallic NLs always leads to the decrease of PL intensity of InP while the partial coverage by metal nanoparticles leads to the enhancement of InP PL signal. Enhancement of PL intensity is interpreted as due to the interaction of emitted radiation with localized surface plasmons bound to deposited metal nanoparticles. On the other hand the presence of surface plasmons bound to deposited nanolayers does not enhance the PL emitted from InP and the effect of reduced excitation of InP, covered by metallic NLs, prevails.

The work was supported by the Czech Science Foundation project No. 102/09/1037 and by the Academy of Sciences of the Czech Republic under project KAN401220801.

- [1] Karel Žďánský, Pavel Kacerovský, Jiří Zavadil, Jan Lorinčík, Anton Fojtík: *Nanoscale Res. Lett.* 2 (2007) 450- 454.
 [2] Jan Grym, Olga Procházková, Roman Yatskiv, Kateřina Piksová: *Nanoscale Res. Lett.* 6 (2011) 392-397.

2P07**ANTIMIKROBIÁLNÍ AKTIVITA A TOXICITA NANOČÁSTIC STŘÍBRA**

Aleš Panáček¹, Libor Kvítek¹, Robert Pucek¹, Milan Kolář²

¹*Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 77146 Olomouc, ales.panacek@upol.cz*
²*Ústav mikrobiologie, Lékařská fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Hněvotínská 3, 77515 Olomouc, milan.kolar@upol.cz*

Metoda přípravy nanočástic stříbra pomocí modifikovaného Tollensova procesu, vyvinutá na našem pracovišti, umožňuje připravit nanočástice stříbra s velikostí od 25 nm do 100 nm [1]. In vitro studie antimikrobní aktivity nanočástic stříbra s velikostí 25 nm prokázaly jejich vysokou antibakteriální a antifungální aktivitu při koncentracích v jednotkách mg/L stříbra [1,2]. Takto nízké koncentrace zároveň nevykazovaly cytotoxický účinek vůči lidským buňkám (fibroblastům) [2] a zároveň nevykazovaly environmentální toxicitu vůči organismům *Paramecium caudatum* či *Drosophila melanogaster* [3]. Cytotoxický a ekotoxický účinek nanočástic stříbra byl pozorován při koncentracích vyšších než 30 mg/L stříbra. Naproti tomu iontové stříbro (AgNO₃), které vykazuje antimikrobní aktivitu při srovnatelných koncentracích jako nanočástice stříbra, vykazuje daleko vyšší toxicitu jak vůči fibroblastům (LC50 (24 hod) = 1 mg/L Ag), tak i vůči organismu *Paramecium caudatum* (LT50 = 0,4 mg/L Ag) [2,3]. I přestože jsou nanočástice stříbra méně toxické než iontová forma stříbra, je nutné dbát zvýšenou pozornost při používání a likvidaci komerčních produktů s obsahem nanočástic stříbra vzhledem k jejich možné ekotoxicitě a toxicitě vůči lidskému organismu při koncentracích vyšších než 30 mg/L stříbra.

Tato práce byla podpořena projekty OP VaVpI reg. číslo CZ.1.05/2.1.00/03.0058, MŠMT ČR MSM6198959218 a MSM6198959223, GAČR GAP304/10/1316 a vnitřním grantem UP Olomouc PrF_2011_020.

- [1] A. Panacek et. al., *J. Phys. Chem. B*, 110, 16248, (2006).
 [2] A. Panacek et. al., *Biomaterials*, 6, 6333, (2009).
 [3] L. Kvítek et. al., *J. Phys. Chem. C*, 113, 4296, (2009); A. Panacek et. al., *Environ. Sci. Technol.*, 45, 4974, (2011)

2P08**REKRYSALIZACE NANOČÁSTIC
STŘÍBRA A JEJICH POUŽITÍ
V POVRCHEM ZESÍLENÉ RAMANOVĚ
SPEKTROSKOPII**

Robert Prucek, Ariana Fargašová, Aleš Panáček,
Libor Kvítek

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

Fleischmannův objev povrchem zesíleného Ramanova rozptylu (SERS) v roce 1974 na stříbrné elektrodě a zejména jeho znovuobjevení na koloidních částicích stříbra v roce 1977 Creightonem znamenal vznik nové velmi citlivé analytické metody, umožňující detekci molekul v oblasti piko až femtomolů.[1]

Mezi běžně využívané materiály v oblasti SERS patří koloidní částice stříbra. Tyto částice nemusí samy o sobě výrazně zesilovat Ramanův rozptyl a musejí být za tímto účelem aktivovány, například pomocí přídavků anorganických iontů, zejména chloridů. Jedno z možných vysvětlení většího zesílení Ramanova signálu po přídavku zmíněných iontů může být dáno vznikem agregátů částic stříbra. Výsledné koncentrace chloridů v aktivovaných disperzích se běžně pohybují v rozsahu od 0,1 do 10 mmol.dm⁻³.

Použití o několik řádů vyšších výsledných koncentrací chloridů (400 mmol.dm⁻³) vede k rekystalizaci nanočástic stříbra (30 nm) na částice stříbra o rozměrech několika stovek nanometrů. Transformované částice stříbra vykazují efekt zesílení při použití excitace jak ve viditelné oblasti (488 nm), tak i v blízké infračervené oblasti (1064 nm) [2].

Tato práce byla podpořena projekty OP VaVpI reg. číslo CZ.1.05/2.1.00/03.0058, MŠMT ČR MSM6198959218 a MSM6198959223, GAČR GAP304/10/1316 a vnitřním grantem UP Olomouc PrF_2011_020.

- [1] K. Kneipp, Y. Wang, R. R. Dasari, M. S. Feld, *Applied Spectroscopy* 49, 780 (1995)
[2] R. Prucek, A. Panáček, A. Fargašová, V. Ranc, V. Mašek, L. Kvítek, R. Zbořil: *CrystEngComm* 13, 2242 (2011)

2P09**TENKÉ VRSTVY OXIDU ZINEČNATÉHO
PŘIPRAVENÉ METODOU MOVPE**

Zdeněk Sofer¹, David Sedmidubský¹, Filip Šaněk¹, Štěpán Huber¹, Ladislav Nádherný¹, Miroslav Maryško², Jiří Hejtmánek², Karel Jurek², Martin Mikulics³

¹Ústav anorganické chemie, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká Republika

zdenek.sofer@vscht.cz

²Fyzikální ústav AVČR, v.v.i., Cukrovarnická 10/112, 162 00 Praha 6, Česká Republika

³Institute of Bio- and Nanosystems,

Forschungszentrum Jülich, D-52425 Jülich, Německo

Oxid zinečnatý patří mezi širokopásové polovodiče a v případě dotace prvky *d* a *f* je tento materiál velmi perspektivním kandidátem pro novou oblast mikroelektroniky – spintroniku. V současnosti není depozice kvalitních epitaxních vrstev materiálů na bázi ZnO ještě zcela technologicky zvládnuta zejména z důvodů nedostupnosti kvalitních substrátů pro homoepitaxní růst a z důvodů velmi prudké reakce organokovových prekurzorů zinku s prekurzory kyslíku.

V našem příspěvku představujeme epitaxní růst ZnO a ZnO:Mn vrstev pomocí metody sprejové MOVPE, kdy prekurzory Zn resp. Zn a Mn jsou dávkovány do reaktoru v kapalně podobě a následně rozptýleny na vstupu do reaktoru ultrazvukovým rozprašovačem a zplyněny ve vstupní části reaktoru. Vlastní depozice probíhá na safírovém substrátu umístěném na indukčně vyhřívaném inkelovém nosiči. Depoziční reaktor je vybaven vakuovým systémem se stabilizací tlaku.

Povrchová morfologie epitaxních vrstev byla charakterizována pomocí optické mikroskopie s DiC, AFM a SEM. Koncentrace manganu byla zjišťována elektronovou mikrosondou a získaná data byla použita i pro výpočet tloušťky-Strukturální kvalita vrstev byla studována pomocí rtg. difrakce. Magnetické vlastnosti byly měřeny pomocí SQUID v teplotním rozsahu 5 K – 300 K.

Tato práce vznikla za podpory GAČR (projekt č. 104/09/0621) a Ministerstva Školství ČR (projekt č. MSM6046137302).

2P10 KOALESCENCE V TAVENINÁCH POLYMERNÍCH SMĚSÍ

Josef Jůza¹, Ivan Fortelný¹, Bojan Dimzoski¹

¹Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v. v. i.,
Heyrovského nám. 1888/2, 162 06 Praha 6,
juza@imc.cas.cz

V dřívějších pracích byla studována koalescence (splývání) kulových částic viskozni kapaliny ve viskozni matrici [1]. Růst kapek o poloměru R popisuje rovnice

$$\frac{dR}{dt} = \frac{R}{3t_c}$$

V ní je t_c koalescenční čas, tj. doba, za kterou poklesne vzdálenost mezi částicemi z počáteční hodnoty h_0 na kritickou hodnotu h_c . Při postupu popsaném v publikaci [1] je h_0 nahrazeno střední vzdáleností mezi povrchy náhodně rozložených koulí $\langle h_0 \rangle$. Tento postup však předpovídá růst objemu částic lineárně s časem, což neodpovídá experimentálně zjištěnému průběhu. V nedávné práci [2] jsme porovnali různé způsoby výpočtu $\langle h_0 \rangle$ a přímé středování t_c s použitím distribuční funkce pro rozdělení aktuálních h_0 ; všechny opět vedly k lineárnímu růstu objemu částic.

K růstu velikosti částice přispívá počet srážek částic. Proto je třeba průměrovat převrácenou hodnotu koalescenčního času. Tím dostáváme extrémně velké příspěvky částic nacházejících se velmi blízko a rychlejší než lineární růst objemu částic s časem. Vyloučením příspěvku dvojic částic, u kterých od počátku experimentu uplynul koalescenční čas (splynuly), získáme křivku odpovídající tvarem lépe experimentálně zjištěnému průběhu, ale předpovídající příliš pomalou koalescenci. Předpoklad zachovávaného se rozložení částic vede tedy k přecenění, zatímco vyloučení zkoaleskovaných částic k podcenění rychlosti koalescence. Pro korektní řešení problému je tedy třeba nalézt realistický model vývoje distribuce částic během koalescence.

Práce byla podporována Grantovou agenturou ČR grantem číslo P106/11/1069.

[1] Fortelný I, Živný A.: Polymer 39, 2669-75 (1998)

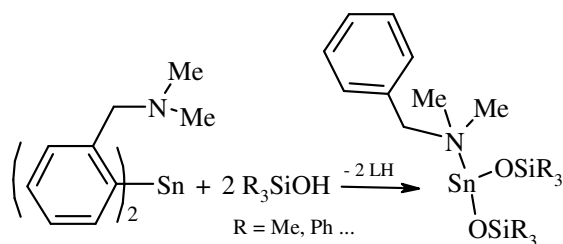
[2] Fortelný I., Jůza J., B. Dimzoski: J. Rheol., submitted

2P11 C, N-CHELATOVANÝ STANNYLEN A JEHO REAKTIVITA SE SILOXANY

Zdeňka Padělková, Aleš Růžička a Aneta Zouharová

Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice,
Studentská 573 532 10 Pardubice,
zdenka.padelkova@upce.cz

Byla studována reaktivita sloučeniny (obr. 1), která obsahovala atom cínu v nižším (+II) oxidačním stavu (stannylen) a ligand s chelatujícím efektem (konkrétně: 2-(*N,N*-dimethylaminomethyl)fenyl-), s různými siloxany. U připravených produktů byly studovány strukturální vlastnosti, jak v roztoku pomocí NMR spektroskopie tak i v případě pevné fáze pomocí XRD analýzy na monokrystalickém materiálu. Dále byly provedeny i reakce siloxanů se stannoxany, jež byly připraveny snadnou oxidací výchozího stannylenu kyslíkem[1]. Potenciální katalytické a materiálové aplikace budou diskutovány.



Obr. 1 Schématické znázornění reakce stannylenu a siloxanů.

Grantové agentuře České republiky patří velký dík za finanční podporu (207/10/P092).

[1] a) Z. Padelkova, M. S. Nechaev, Z. Cernosek, J. Brus, A. Ruzicka Organometallics 2008, 20, 5303.

b) Z. Padelkova, H. Vankatova, I. Cisarova, M. S. Nechaev, T. A. Zevaco, O. Walter, A. Ruzicka Organometallics 2009, 8, 2629.

2P12 ACYL FERROCENY JAKO SIKATIVA PRO ALKYDOVÉ NÁTĚRY

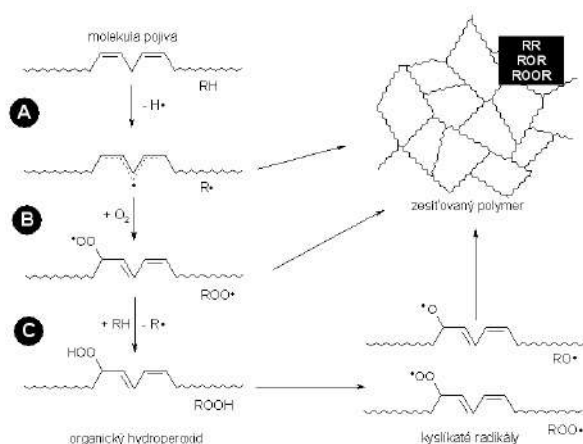
Milan Erben¹, Jaromír Vinklár¹, Petr Kalenda², David Veselý²

¹Katedra obecné a anorganické chemie, ²Ústav chemie a technologie makromolekulárních látek, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice, milan.erben@upce.cz

Alkydové pryskyřice jsou široce využívány jako pojiva v nátěrových hmotách a vzhledem

k vysokému obsahu (až 70% ve vysokosušivých nátěrových hmotách) nenasyčených přírodních olejů představují významnou průmyslovou komoditu vyráběnou z obnovitelných zdrojů. Proces zasychání alkydového nátěru, tzv. autooxidace, probíhá poměrně pomalu a je nutno jej katalyzovat sloučeninami přechodných kovů. Bez těchto katalyzátorů je nátěrová vrstva kompletně vytvrzená až po několika měsících, zatímco s jejich použitím již za několik hodin. Běžně používaná kobaltnatá sikaiva jsou vzhledem ke svým negativním biologickým účinkům (karcinogenita a genotoxická aktivita) stále častěji nahrazována látkami méně nebezpečnými. [1] Jednou z možností se jeví být acylferroceny, jejichž sikaivační aktivita byla poprvé popsána naší pracovní skupinou. [2,3]

V příspěvku budou prezentovány výsledky studia sikaivační aktivity ferrocenových derivátů s benzoylovými, acetylovými či trifluoracetylovými substituenty na Cp kružích. Bylo zjištěno, že všechny tyto sloučeniny významně zkracují dobu zasychání alkydového pojiva. Výsledné polymerní filmy vykazují vlastnosti (např. tvrdost, lesk) srovnatelné se systémy obsahující komerční kobaltnatá sikaiva. Kinetika autooxidačního procesu byla sledována pomocí FTIR spektroskopie, viz obr. 1. Pro studium mechanismu zasychání byla také využita spin-trapping EPR technika. Nejvyšší sikaivační aktivita byla pozorována u benzoylferrocenu, který způsobuje rychlejší nárůst tvrdosti polymerního filmu i kratší dobu zasychání než kobaltnaté sikaivum. Byl také zkoumán synergický efekt mezi karboxyláty kobaltnatými a ferrocenovými deriváty ve směsných sikaivačních systémech.



Obr. 1 Schematické znázornění autooxidace nenasyčeného pojiva. Písmeny A-C jsou označeny procesy, které byly sledovány FTIR

spektroskopii. Přítomné radikály byly identifikovány EPR spektroskopii s využitím spinových lapačů.

Tento projekt je financován Grantovou agenturou české republiky (GA 104/09/0529).

- [1] Lison, D.; De Boeck, M.; Verougstraete, V.; Kirsch-Volders, M., *Occ. Environ. Med.*, 58 (2001) 619-625.
- [2] Kalenda, P.; Holecek, J.; Vesely, D.; Erben, M., *Prog. Org. Coat.*, 56 (2006) 111-113.
- [3] Štáva, V.; Erben, M.; Veselý, D.; Kalenda, P., *J. Phys. Chem. Solids*, 68 (2007) 799-802.

2P13 ELEKTROCHEMICKÉ CHOVÁNÍ AMINOKARBENOVÝCH KOMPLEXŮ Cr(0) A Fe(0) S HETEROCYKLIČKÝM SUBSTITUENTEM

Radka Metelková^a, Tomáš Tobrman^b, Jiří Ludvík^c, Irena Hoskovcová^a

^aÚstav anorganické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika, hoskovci@vscht.cz

^bÚstav organické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika

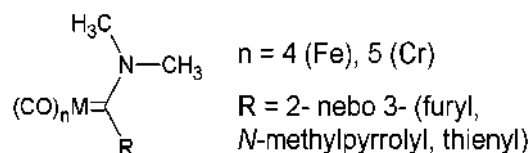
^cÚstav fyzikální chemie J Heyrovského AV ČR, v. v. i. Dolejškova 3, 182 23 Praha 8, Česká republika, ludvik@jh-inst.cas.cz

Byly studovány komplexy, které mají jako centrální kov atom chromu popř. železa, na ně se dále váží karbonylové ligandy a dále jeden karbenový ligand (Obr. 1). Karbenovým ligandem se myslí atom uhlíku vázaný na kov dvojnou vazbou, který nese ještě dva různé substituenty. Prvním substituentem je *N,N*-dimethylaminoskupina a druhým heterocyklický kruh. V této práci byly studovány komplexy, kde heterocyklickým substituentem byl furan, pyrrol a thiofen. Přítomnost různých heterocyklických substituentů na karbenovém uhlíku mělo za cíl ukázat vliv substituce na karbenovém ligandu na redoxní chování aminokarbenového komplexu.

Redoxní chování látek bylo studováno elektrochemicky. V souladu s předchozími pracemi [1] se ukázalo, že navázáním heterocyklu na karbenový uhlík má vliv především na redukční chování zkoumaných komplexů, zatímco jejich oxidační vlastnosti neovlivní. Heterocyklický substituent může ovlivňovat redukční chování několika efekty, jsou to především indukční, mezomerní a sterické vlivy. U studovaných látek byly pozorovány

druhé dva ze zmíněných efektů. Mezomerní efekt se uplatňuje v závislosti na poloze, kterou se heterocyklický substituent váže. V případě heterocyklických kruhů vázaných na karbenový uhlík polohou dva je redukce výrazně usnadněna. Sterické vlivy byly pozorovány u komplexů s vázaným pyrrolem, který na dusíkovém heteroatomu obsahuje vázanou methylovou skupinu. Tato skupina brání rotaci heterocyklického kruhu a redukce je výrazně znesnadněna.

Nakonec byla snaha objasnit mechanismus zkoumaných redoxních reakcí uvedených aminokarbenových komplexů, především mechanismus jejich redukce. Voltametrická měření naznačují, že se komplexy v roztoku vyskytují ve dvou konformerech, které se dále redukují s přijetím dvou elektronů. Komplexy uvedeného typu se nejčastěji využívají především jako katalyzátory při organických syntézách např. při olefinové metathesi.



Obr. 1 N,N-dimethylaminokarbenové komplexy Cr(0) a Fe(0) s heterocyklickým substituentem.

Tato práce vznikla za podpory GA AV CR (grant č. IAA 00400813).

[1] Hoskocová, I.; Dvořák, D.; Ludvík, J.; Zálíš, S. Achievements in Coordination, Bioinorganic and Applied Inorganic Chemistry, 21st International Conference on Coordination and Bioinorganic Chemistry, Smolenice, 3.-8. června, 2007; Melnik, M. ; Šima, J. and Tatarko, M., Eds.; Slovak Technical University Press: Bratislava, 2007.

2P14

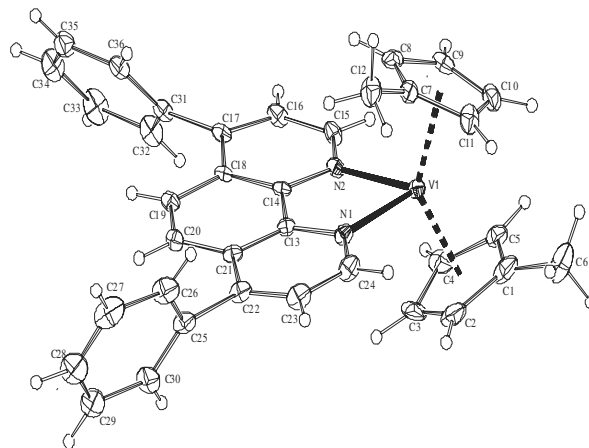
SYNTEZA, CHARAKTERIZACE A CYTOTOXICKÁ AKTIVITA VANADOCENOVÝCH KOMPLEXŮ S N,N-CHELÁTUJÍCÍMI LIGANDY

Jaromír Vinklárek¹, Hana Hurychová¹, Veronika Jůzová¹, Zdenka Padělková¹, Jan Honzíček¹, Aleš Eisner¹

¹Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studencká 573, Pardubice, 532 10, jaromir.vinklarek@upce.cz

Z chloridů vanadocenových komplexů byla reakcí s N,N-chelátujícími ligandy připravena série látek

[Cp₂V(bpy)][OTf]₂ (I), [(MeCp)₂V(bpy)][OTf]₂ (II), [(i-PrCp)₂V(bpy)][OTf]₂ (III), [Cp₂V(phen)][OTf]₂ (IV), [(MeCp)₂V(phen)][OTf]₂ (V), [Cp₂V(nitrophen)][OTf]₂ (VI), [(MeCp)₂V(nitrophen)][OTf]₂ (VII), [Cp₂V(bathophen)][OTf]₂ (VIII), a [(MeCp)₂V(bathophen)][OTf]₂ (IX). Komplexy byly charakterizovány pomocí vhodných analytických a spektroskopických metod. Především na základě EPR spektroskopie byla navržena chelátová struktura u všech izolovaných produktů, která byla v případě komplexů II, V, VIII a IX potvrzena rentgenostrukturální analýzou. Na základě dobré rozpustnosti v aplikačních mediích byly všechny komplexy podrobeny testům cytotoxické aktivity na dvou buněčných liniích MOLT-4 (buňky lidské T-lymfocytární leukemie) a HL-60 (buňky lidské promyelocytární leukemie). Nejúčinnější byly sloučeniny II a IV s hodnotami odpovídajícím standardně používanému cytostatiku *cis*-DDP (Pt(NH₃)₂Cl₂). Tyto výsledky s vědomím nižší toxicity vanadocenových komplexů dávají slušné vyhlídky pro další studium těchto komplexů.



Obr. 1 Struktura kationtové části komplexu IX

Tato práce vznikla s podporou výzkumného záměru MŠMT 0021627501.

2P15**UNUSUAL MIXED-VALENCE AND MIXED-CATION ANTIFERROMAGNETIC FLUOROSULFATES OF SILVER(II)**Tomasz Michałowski¹, Wojciech Grochala^{1,2}¹Faculty of Chemistry, University of Warsaw, Pasteura 1, 02-093 Warsaw, tmichalowski@chem.uw.edu.pl²Interdisciplinary Centre for Mathematical and Computational Modelling, University of Warsaw, Al. Żwirki i Wigury 93, 02-089 Warsaw

Chemistry of Ag(II) is not very well developed. Only a handful of compounds has been characterized (mostly fluorides), a few of them only vaguely. Among them stand two fluorosulfates, a mixed-valence Ag(I)-Ag(II) $\text{Ag}_3(\text{SO}_3\text{F})_4$ and a mixed-cation K-Ag(II) $\text{K}_2\text{Ag}(\text{SO}_3\text{F})_4$. They were reported by F. Aubke et al. in 1978¹ to exhibit antiferromagnetic properties with unusually high Neel temperatures (240 and 300 K respectively). This properties render them as potential precursors to high-temperature superconductors based on silver(II) via the electron or hole doping².

Several attempts were made to synthesize and characterize both compounds as well as another potassium-silver(II) fluorosulfate, $\text{KAg}(\text{SO}_3\text{F})_3$, which was never reported in literature. The compounds were studied by a number of methods, including Raman spectroscopy, both mid- and far- infrared spectroscopy, X-ray powder diffraction, magnetometry, and electron paramagnetic resonance.

While the synthesis of $\text{Ag}(\text{I})_2\text{Ag}(\text{II})(\text{SO}_3\text{F})_4$ was successful and allowed the crystal structure of the compound to be determined and its physicochemical properties to be studied³, all attempts to synthesize the potassium-silver(II) compounds resulted in multi-phase products. Also, attempts were unsuccessful to clearly confirm the chemical identity of the potassium-silver(II) phases.

[1] Leung P. C., Aubke F.: *Inorg. Chem.* (1978) 17, 1765[2] Grochala W., Hoffman R.: *Angewandte Chem. Int. Ed.* (2001) 40, 2742[3] T. Michałowski, P. Malinowski, M. Derzsi, Z. Mazej, Z. Jaglicic, P. Leszczyński, W. Grochala.: *Eur. J. Inorg. Chem.*, (2011) 2508**2P16****MONTMORILLONIT A JEHO ORGANODERIVÁTY JAKO ADSORBENTY KOVŮ**Eva Vítámvášová¹, Adriana Plačková¹, Eva Plevová², Zuzana Navrátilová¹, Lenka Vaculíková²¹ Ostravská univerzita v Ostravě, 30. dubna 22, 701 33, Ostrava² Ústav geoniky AV ČR, Studentská 1768, 708 00, Ostrava-Poruba

Tato práce se zabývá odstraněním hexadecylpyridiniového kationtu, benzyl-dimethylhexadecylamoniového kationtu, hexadecyltrimethylamoniového kationtu, Cu^{2+} , Zn^{2+} a Ni^{2+} z vodných roztoků montmorillonity SAZ-1 a SWy-2 a srovnává sorpční vlastnosti uvedených montmorillonitů s jejich organoderiváty. Sorpční izotermy organických kationtů vykázaly maximální hodnotu nasorbovaného množství při 7,5 mmol/l; tato koncentrace byla použita pro přípravu organoderivátů. Struktura připravených organoderivátů byla zkoumána pomocí FTIR spektroskopie a RTG difrakce. FTIR spektroskopie potvrdila přítomnost alkylamoniových kationtů v modifikovaných jílech a RTG difrakcí byla prokázána interkalace do mezivrstev.

Byl studován vliv času na sorpci Cu^{2+} , Zn^{2+} a Ni^{2+} na původních montmorillonitech i na jejich organoderivátech. Nejvyšší sorpce na SAZ-1 byla zaznamenána po 8, 2 a 4 hodinách a na SWy-2 po 24, 8 a 4 hodinách v pořadí Cu^{2+} , Zn^{2+} a Ni^{2+} . V případě původních jílu bylo zjištěno, že montmorillonit SWy-2 má vyšší sorpční kapacitu pro studované kovy než SAZ-1. Modifikace snížila sorpční kapacitu obou montmorillonitů díky obsazení iontovýměnných míst alkylamoniovými kationty, výraznější snížení kapacity bylo zjištěno v případě organoderivátů SAZ-1.

Získané výsledky budou rozšířeny o studium současné sorpce kovů a alkylamoniových kationtů, což by mohlo mít praktický význam při čištění odpadních vod.

Tato práce vznikla za podpory projektu sgs18/PrF/2011 specifického VŠ výzkumu, OU Ostrava.

2P17**THE COORDINATION COMPOUNDS
Cu(II) WITH PYRIDYLMETHANOLS**

Marian Koman¹, Ján Moncol¹, Dušan Valigura¹
and Jaroslava Maroszová¹

¹ *Department of Inorganic Chemistry, Slovak
Technical University, Radlinského 9, 812 37
Bratislava, Slovakia*

The syntheses and determination of the crystal structure of copper(II) coordination compounds has been the subject of many recent studies with the aim of understanding the relation among composition, structure and properties coordination compounds. The copper(II) carboxylates have been the subject of numerous investigations, especially with nitrogen donor ligands [1]. Copper(II) ions play a vital role in a number of widely differing biological processes, and their interaction with drugs administered for therapeutic reasons is of considerable interest. Some carboxylic acids and their derivatives also play an important role in biological processes [2]. The pyridylmethanols [2-pyridylmethanol (2-pyme), 3-pyridylmethanol (3-pyme), as well ronicol (ron) and 4-pyridylmethanol (4-pyme)] have interesting properties in biological systems as anti-inflammatory agents [6]. From structural point of view pyridylmethanols prefers definite types of structures. In this lecture, we will be presenting no usual crystal structures of Cu(II) complexes with pyridylmethanols.

The authors wish to thank the Slovak Ministry of Education (VEGA project 1/0562/10) for financial support.

(a) Milan Melník, *Coord. Chem. Rev.* 42, (1982) 259. (b) Kato M., Muto Y.: *ibid*, 92, (1988) 45

Marian Koman, Milan Melník, Ján Moncol and Tadeusz Glowiak: *Inorg. Chem. Comm.* 3, (2000) 489

Milan Melník, Kimmo Smolander and Patrick Sharrock: *Inorg. Chim. Acta* 103, (1985) 187

2P18**ZMENA REAKČNÝCH PODMIENOK,
CESTA K VZNIKU RÔZNYCH
SUBSTITUOVANÝCH
BENZOÁTOMEĎNATÝCH KOMPLEXOV
S *N,N*-DIETYLNIKOTÍNAMIDOM**

Jana Medvecká¹, Ján Moncol¹, Dušan Valigura¹

¹ *Oddelenie anorganickej chemie ÚAČHTaM, FCHPT
STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava,
jana.medveck@stuba.sk*

Z predchádzajúcich experimentov je známy vplyv niektorých reakčných podmienok (teplota, reakčný čas, stechiometria reaktantov, druh rozpúšťadla, zriedenie) na vznik rôznych komplexov medi [1, 2]. Analýzou sústav obsahujúcich monosubstituované nitro- a halogeno- benzoátové anióny a rôzne dusíkaté ligandy sa potvrdila potreba skúmania aj sústav s *N,N*-dietyl nikotínamidom. V niektorých prípadoch sa ukázala blízka podobnosť správania sa chlórbenzoovej kyseliny a brómbenzoovej kyseliny v porovnaní s kyselinou nitrobenzoovou, zatiaľ čo v iných sa objavila výraznejšia podobnosť sústav obsahujúcich anióny chlórbenzoovej a nitrobenzoovej kyseliny. Pri použití halogenobenzoových kyselín, pri mólovom pomere med' : ligand = 2 : 1, 1 : 1, zo sústav vo väčšine prípadov kryštalizoval komplex všeobecného zloženia $[\text{Cu}_2(\text{Y-Xbz})_4(\text{denia})_2]$, (kde X = Cl, Br, Y = 2, 3, 4) na rozdiel od kyseliny nitrobenzoovej, kde prednostne kryštalizovali polymérne komplexy $[\text{Cu}_2(2\text{-NO}_2\text{bz})_4(\text{denia})_1]_n$ a $[\text{Cu}_2(\text{Y-NO}_2\text{bz})_2(\text{denia})_1(\text{H}_2\text{O})_1]_n$, (kde Y = 3, 4). Aj napriek odlišnostiam, však boli pozorované isté podobnosti vo všetkých sústavách. Jedná sa o pomer reaktantov med' : ligand = 1 : 2 a zvýšenú reakčnú teplotu. Vtedy z reakčnej zmesi kryštalizovali monomérne produkty zloženia $[\text{Cu}(\text{Y-Xbz})_2(\text{denia})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$, (kde X = NO₂, Cl, Br, Y = 2, 3, 4). V týchto sústavách sa ukázal aj významný vplyv rozpúšťadla. Najviac tým boli ovplyvnené sústavy obsahujúce 2-halogenobenzoové kyseliny. Pri použití metanolu a etanolu ako rozpúšťadla, zo sústav kryštalizovali komplexy zloženia $[\text{Cu}_2(2\text{-Xbz})_4(\text{denia})_2] \cdot [\text{Cu}_2(2\text{-Xbz})_4(\text{solv})_2]$, (kde X = Cl, Br, solv = metanol, etanol). Všetky komplexy boli charakterizované IČ a UV spektroskopiou a elementárnou analýzou. Mnohé komplexy boli podrobené aj RTG analýze.

Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA 1/0562/10.

[1] Jana Kavalírová, Maria Korabik, Petra Stachová, Ján Moncol, Reijo Sillanpää, Tadeusz Lis, Dušan Mikloš, Milan Melník, Jerzy Mroziński, Dušan Valigura: *Polyhedron*, (2008), 27, 1333.

[2] Zuzana Vasková, Ján Moncol, Maria Korabik, Jana Medvecká, Jozef Švorec, Zdeňka Padělková, Marián Valko, Dušan Valigura: *Polyhedron*, (2011), 30, 86.

2P19

RESONANCE ENERGY TRANSFER IN THIN FILMS PREPARED USING LAYER-BY-LAYER ASSEMBLY

Adriana Czímerová¹, Juraj Bujdák¹

¹ *Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta č. 9, 845 36 Bratislava, Adriana.Czimerova@savba.sk*

Layer-by-layer (LBL) assembly is one of the most promising routes to prepare thin films with controllable structure and arrangement of the components, and alternating oppositely charged particles or ions. Materials prepared using LBL technique exhibit substantial properties for potential optical, electronic and sensor applications. The main idea of our work was to prepare films of nanometer thickness based on clay mineral layers and containing dyes and ionic polymer chains and exhibiting unique optical and photophysical properties.

The LBL films investigated in this work were prepared using sequential deposition of the components from ionic polymer (polydiallyldimethylammonium chloride) solution and smectite/laser dyes colloid. Two types of laser dyes were used with appropriate optical properties to interact via fluorescence resonance energy transfer (FRET). FRET is a phenomenon of radiationless transmission of energy between energy donor and energy acceptor molecules, played by Rhodamine 3B and Rhodamine 6G, respectively. One of the main goals of this study was to elucidate and compare the efficiency of the FRET process and to find the conditions for energy transfer with high yields. FRET measurement provided the evidence on correctness of the structural models of deposited components in prepared LBL films.

This contribution is the result of the project implementation: Centre for materials, layers and systems for applications and chemical processes under extreme conditions - Stage II supported by the Research & Development Operational Programme funded by the ERDF.

2P20

ADSORPCE Pb^{II}, Cu^{II} A Cr^{III} NA ŽELEZITÝCH SRAŽENINÁCH

Roman Maršálek

Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita v Ostravě, 30. dubna 22, Ostrava, Czech republic, roman.marsalek@osu.cz

Při výrobě chloridu zinečnatého vzniká jako vedlejší (odpadní) produkt, špatně filtrovatelná hmota. Svým složením spadá do kategorie nebezpečného odpadu a to s sebou pochopitelně přináší zvýšené ekonomické náklady. Tento sediment obsahuje kromě sloučenin železa a vlhkosti, také poměrně vysoký obsah chloridu zinečnatého. Vysoký obsah zinku je důvodem, proč se tento produkt nedá použít jako druhotná surovina při výrobě železa či oceli. Způsob jak snížit obsah zinku je někdy nazýván jako „goethitové“ srážení. Při tomto ději dochází k vysrážení železa na bázi oxidu hydroxidu železitého. V laboratorních podmínkách byl tento proces proveden, přičemž bylo upravováno pH (velmi kyselé), teplota (cca 80 °C) a různila se také doba srážení. Byla získána celá řada sráženin, které se lišily v elementárním složení, ale také mineralogicky. Zajímavý byl jejich specifický povrch, cca 250m².

Hlavním cílem této práce je vyhodnotit potencionální využití sráženin železa, jako materiálu k odstraňování těžkých kovů z vodných roztoků. Modelově byly vybrány ionty olova, mědi a chromu (III). Po vyhodnocení experimentálních dat, byl adsorpční děj popsán pomocí Langmuirovy teorie. Byly tedy vypočteny adsorpční maxima pro jednotlivé kovy ($a_m = 0.76$ mmol g⁻¹ pro olovo, 0.58 mmol g⁻¹ pro měď, 0.38 mmol g⁻¹ pro chrom). Pomocí měření zeta potenciálu byly také sledovány změny na povrchu částic. Adsorpce kationtů těžkých kovů vedla k posunu zeta potenciálu ke kladným hodnotám. Adsorpční kapacita je v porovnání s ostatními adsorpčními materiály minimálně srovnatelná. Odpadní sloučeniny železa by se tedy mohly zařadit do kategorie levných adsorpčních materiálů vhodných pro odstraňování těžkých kovů z odpadních vod.

Práce vznikla v rámci projektu Ministerstva průmyslu a obchodu, „TIP“, č. FR-TII/246.

2P21**PRÍPRAVA A VLASTNOSTI
KOMPOZITNEJ SiC – CNT KERAMIKY**

M. Hnatko¹, Evelyn A. Bolaños C.², Š. Kavecký³,
Z. Jonšta², P. Šajgalík¹

¹Ústav anorganickej chémie SAV, Dúbravská cesta 9,
Bratislava, Slovensko

²VŠB – Technická univerzita Ostrava, Česká republika

³Ústav materiálov a mechaniky strojov, SAV,
Bratislava, Slovensko

Práca je zameraná na optimalizáciu podmienok prípravy kompozitného SiC s prídavkom uhlíkových nanotrubičiek. Uhlíkové nanotrubičky boli na povrch submikronového SiC prášku nanášané CVD metódou tepelným rozkladom C₂H₂. Ako katalyzátor pre tvorbu uhlíkových nanotrubičiek bolo použité železo. Homogénnu distribúciu nanočastíc Fe na povrchu SiC sme dosiahli procesom mletia SiC prášku za použitia oceľových mlecích telies alebo vyzrážaním koloidných častíc z vodného roztoku vo forme hematitu (α -Fe₂O₃) [1]. Ako spekanie prísady boli použité Y₂O₃ (14.2 hm% a AlN (0.6 hm%). Hutné materiály sa pripravili žiarovým lisovaním východiskovej zmesi, z ktorej po nanosení CNT, bolo odstránené železo praním v kyseline chlorovodíkovej. Na pripravených hutných vzorkách sa sledovali zmeny v mikroštruktúre a ich vplyv na mechanické vlastnosti (K_{IC}, H_V) [2, 3].

Táto práca bola podporovaná Slovenskou grantovou agentúrou VEGA 2/0036/10 a APVV-0448-06.

[1] E. Matijević, Chem Mater. 5 (1993) 412-426

[2] R. Kobayashi, J. Tatami, T. Wakihara, T. Meguro, K. Komeya, J. Am. Ceram. Soc., 89 [4] (2006) 1295-1299

[3] C.H. McMurtry, M.R. Kasprzyk, and R.G. Naum, Mater. Res. Bull., 7 [1], (1972) 411-420

2P22**CHARACTERIZATION OF ORGANO-MONTMORILLONITES BY NEAR-INFRARED SPECTROSCOPY**

Jana Madejová¹, Ľuboš Jankovič¹, Peter Komadel¹

¹Institute of Inorganic Chemistry SAS Bratislava,
Slovakia, jana.madejova@savba.sk

Near infrared (NIR) spectra of organo-montmorillonites were analyzed to show the advantages of this spectral region in identification of specific bonds “not visible” in the middle infrared region. Na-montmorillonite and different

alkylammonium cations were used for organo-montmorillonites preparation. The first overtone (2ν_{XH}) and combination (ν+δ)_{XH} bands of XH groups (X=O,C,N) were identified. The complex band near 7070 cm⁻¹ was assigned to overlapping 2ν_{OH} of the structural OH groups and bound H₂O molecules, the corresponding combination modes were found near 5250 cm⁻¹ and 4523 cm⁻¹, respectively. The intensity and the position of (ν+δ)_{H₂O} band was strongly affected by the type of the organic cation used. The presence of CH₃ and CH₂ groups was recognized in the 6000-5500 cm⁻¹ and 4450-4100 cm⁻¹ regions, the CH overtone and combination bands of aromatic benzene ring were shifted to higher wavenumbers. The NIR spectra were very useful in identifying NH and vinyl groups. The intensive NH₃⁺ and NH₂⁺ bands were found in the 6600-6050 cm⁻¹ and 5000-4600 cm⁻¹ regions, respectively. The intensity of (ν+δ)_{NH₂⁺} band near 4750 cm⁻¹ was high enough to unambiguously identify this bond. The characteristic band at 6130 cm⁻¹ was assigned to 2ν_{CH₂} in H₂C=C. The results showed that NIR spectroscopy is an extremely useful method for organo-clays characterization providing information often not available from other IR regions.

This contribution is the result of the project implementation: Centre for materials, layers and systems for applications and chemical processes under extreme conditions – Stage II, supported by the Research & Development Operational Programme funded by the ERDF.

2P23**SUPRAMOLECULAR HYDROGEN-BONDING NETWORKS AND ISOMERISM OF MONOMERIC COPPER(II) HALOGENBENZOATES WITH NICOTINAMIDE**

Jozef Halaška, Marian Koman, Ján Moncol

Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK- 812 37 Bratislava, Slovakia, jan.moncol@stuba.sk

Nicotinamide (nia) is known as part of vitamin B group and it is incorporated into nicotinamide adenine dinucleotide (NAD) and nicotinamide adenine dinucleotide phosphate (NADP), which are coenzymes of variety of enzymatic oxidation-reduction reactions [1]. On the other hand, the nicotinamide can be used in supramolecular

chemistry for construction hydrogen-bonding metallo-inorganic frameworks [2].

Now we describe preparation, structural characterization, and supramolecular organization of eighteen monomeric copper(II) complexes featuring nicotinamide $\text{Cu}(\text{RCOO})_2(\text{nia})_2 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ ($x = 0-2$; $\text{RCOO} =$ 2-chlorbenzoate, 3-chlorbenzoate, 4-chlorbenzoate, 2,3-dichlorbenzoate, 2,5-dichlorbenzoate, 2,6-dichlorbenzoate, 3,4-dichlorbenzoate, 3,5-dichlorbenzoate, 2-brombenzoate, 3-brombenzoate, 4-brombenzoate,

3,5-dibrombenzoate, 2-jodbenzoate or 3-jodbenzoate).

We thank Scientific Grant Agency of the Ministry of Education of Slovak Republic for financial support (1/0562/10).

Papanikolou, P.A., Christidis, P.C., Chaviara, A.T., Bolos, C.A., Tsipis, A.C. *Eur. J. Inorg. Chem.* **2006**, 2083.

Beatty, A.M. *Coord. Chem. Rev.*, **2003**, 246, 131.

PREDNÁŠKY - SEKCIA 3: ORGANICKÁ CHÉMIA A POLYMÉRY

3P01

PLASTY AKO ZRANITELNÁ ČASŤ NIEKTORÝCH UMELECKÝCH ARTEFAKTOV

Lyda Rychlá, Jozef Rychlý, Ivica Janigová,
Katarína Csomorová

*Ústav Polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 845 41
Bratislava, upolrych@gsavba.sk*

Polyméry ako nitrát, acetát celulózy a polyvinyl chlorid prípadne polyuretánové peny a laky sa vo výtvarnom umení začali používať začiatkom a v priebehu 20. storočia; mnohé z artefaktov, ktoré ich obsahovali, už neexistujú, alebo sú veľmi poškodené. Štúdiá o typoch plastov, ktoré sa dnes nachádzajú v štyroch západoeurópskych múzeách moderného umenia v 4 krajinách (vo Veľkej Británii, Francii, Dánsku a Holandsku) ukázala, že v prevažnej miere tu sú okrem už vyššie spomenutých polymérov, zastúpené aj fenolformaldehydové živice, prírodný a syntetický kaučuk, poly(metylmetakrylát), polyamidy, polyestery, polyetylén a polystyrén. Žiaľ, kurátori prítomnosť plastov v múzeách veľmi dlho prehliadali. Až od začiatku 21. storočia si začali uvedomovať, že v dôsledku inherentnej nestability plastov a postupne sa rozvíjajúcej degradácie, spojenej so stratou ich úžitkových vlastností, stratou lesku, vzniku prasklín, oderu a „zažraného“ prachu, atď. hrozí celej rade artefaktov kolaps a znehodnotenie. Prítom ide o výtvary staré len niekoľko desaťročí. Podľa dostupných zdrojov [1,2,3] len konzerváciu

alebo prinajmenšom základným ošetrením je ich možné zachovať.

Predložená prednáška rozoberá niektoré detaily tejto neradostnej situácie, problémy identifikácie rozsahu degradačného procesu, vysvetľuje ako plasty degradujú a čo sú rozhodujúce príčiny ich postupného znehodnocovania a opisuje aj príslušné procesy v závislosti od času a prípadne od teploty. Zaoberá sa dostupnými metodológiami zisťovania momentálneho stavu životnosti artefaktov z plastov, tak ako vyplývajú z riešenia projektu 7. rámcového programu EÚ „POPART“ Stratégia zachovania umeleckých artefaktov v muzeálnych zbierkach.

The project has received funding from the European Community' Seventh Framework Program FP7/2008-2013 under the grant agreement no.21228 - POPART: Strategy for the preservation of plastics artefacts in museums collections (na jeho riešení sa podieľajú aj autori tohoto príspevku).

- [1] Yvonne Shashoua: Conservation of Plastics. Materials science, degradation and preservation. Elsevier Ltd., Oxford OX2 8DP, UK (2008).
- [2] Brenda Keneghan: Damage Limitation. Materials Word, March 2011, Page 24-25.
- [3] Friederike Waentig: Plastic in Art. A study from the conservation point of view. Michael Imhof Verlag, Petersberg, Germany (2008).

3P02**TEPELNĚ ODOLNÉ PRYSKYŘICE
KYANÁTOVÉHO TYPU JAKO NOSIČE
PRO IDENTIFIKAČNÍ TĚLÍSKA**

Luboš Prokůpek, Miroslav Večeřa, Radka Adámková

Univerzita Pardubice, FCHT, ÚCHTML, Oddělení syntetických polymerů, vláken a textilní chemie, Studentská 573, 532 10 Pardubice, lubos.prokupek@upce.cz

Tato práce se zabývá výběrem vhodných směsí epoxidových pryskyřic s kyanátovou pryskyřicí (matrice), které mají sloužit jako tepelně a mechanicky odolné nosiče pro různé druhy identifikačních směsí oxidů vytvářejících identifikační kód výbušin.

Stěžejním úkolem práce bylo vybrat optimalizovanou technologii zpracování směsí pryskyřice/oxidy. Bylo důležité zvolit vhodný poměr epoxidové a kyanátové pryskyřice a docílit homogenního zpracování oxidů do této polymerní matrice. Optimalizovanou technologií byly dále připraveny vzorky na bázi různých druhů epoxidových pryskyřic a identifikačních směsí oxidů, do jejichž struktury byl z hlediska lepšího zabudování identifikační směsi přidáván vhodný nosič (plnivo), který bránil rozsazování materiálu při vytvrzování zkušebních desek. Následně byla u připravených materiálů provedena měření za účelem zjištění jejich tepelné a mechanické odolnosti. U vybraných materiálů byly rovněž pořízeny strukturní snímky a diskutován vliv technologie a použitých komponent na vzhled připravených zkušebních desek.

Tato práce vznikla za podpory grantu FR – T11/125.

3P03**EFFECT OF PRINTING INKS ON THE
THERMOOXIDATIVE STABILITY OF
WHATMAN PAPER USING
SIMULTANEOUS DTA/TG METHODS**

András Peller, Milena Reháková, Katarína Vizárová, Peter Šimon

Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia, e-mail: andras.peller@stuba.sk

Effects of different types of ink on the stability of historical newspaper (ink corrosion) will be presented [1]. The motivation of this study was the fact that ink and ink corrosion plays the significant role in deterioration of historical

documents. Historical printed documents representing a large part of the cultural heritage are relatively unstable, they are unique and irreplaceable, hence their degradation means an enormous loss of cultural heritage. Effects of the printing inks (iron-gall, bister and sepia) on the Whatman paper were studied on the basis of the length of induction periods (t_i) estimated at museum's temperature 23 °C. Values of t_i of the samples were calculated using method KARIP [2] based on the new temperature function [3] derived from the experimental dependency between the temperatures at the end of the induction period (T_i) and heating rate (β):

$$T_i = T_{\infty} [1 - \exp(-\beta^a)]$$

where T_{∞} and a are kinetic parameters. The values of T_i were obtained as the onset temperatures of the thermooxidation peaks from the DTA records of samples using nonisothermal linear heating regime.

This study was financially supported by the Slovak Scientific Grant Agency, grant No. VEGA 1/0660/09.

[1] A. Peller: 3rd Joint Czech-Hungarian-Polish-Slovak Thermoanalytical Conference, ISBN 978-80-227-3533-9, 19 (2011).

[2] P. Šimon: J. Therm. Anal. Calorim. 88, 709 (2007).

[3] P. Šimon: J. Therm. Anal. Calorim. 97, 391 (2009).

3P04**FOTOCHEMICKY URÝCHLENÁ
DEGRADÁCIA POLY(E-
KAPROLAKTÓNU)**

Katarína Borská, Martin Danko, Ivica Janigová, Jaroslav Mosnáček

Ústav polymérov SAV, Centrum excelentnosti GLYCOMED, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, katarina.borska@savba.sk

Z aplikačného hľadiska, či už biomedicínskeho alebo environmentálneho, má veľký význam štúdium zamerané na kontrolu rýchlosti degradácie biodegradovateľných polymérnych materiálov [1]. Vplyv fotochemickej transformácie benzilu (1,2-difenyletándiónu) na biodegradovateľný polyester poly(ϵ -kaprolaktón) (PCL) zatiaľ nebol sledovaný. Cieľom tejto práce bolo preštudovať degradáciu PCL v prítomnosti benzilu ako fotoaktívneho dopantu a následne i na rýchlosť hydrolytickej degradácie PCL filmu pomocou IČ spektroskopie a gélovej permeačnej chromatografie (GPC).

Produktom fotochemickej transformácie benzilu v prostredí pevnej polymérnej matrice je

benzoylperoxid (BP) [2]. Kinetika transformácie bola sledovaná IČ spektroskopiou. Množstvo vzniknutého BP závisí od koncentrácie kyslíka v prostredí. So zvyšujúcou sa koncentráciou kyslíka rastie aj množstvo vzniknutého BP. Degradácia PCL matrice je v tomto prípade rýchlejšia aj vďaka vzniku hydroperoxidov na PCL reťazci. Naopak vo vákuu prevláda odštiepovanie vodíka z PCL reťazca benzilom v excitovanom stave, čo následne vedie k disproporcionácii polymérových radikálov a tvorbe gélu.

Zo získaných výsledkov sa nám potvrdilo, že použitím benzilu ako fotoaktívneho dopantu je možné do značnej miery urýchliť fotochemicky degradáciu PCL ako aj kontrolovať rýchlosť následnej hydrolytickej degradácie PCL.

Príspevok bol vytvorený realizáciou projektu Centrum pre Materiály, vrstvy a systémy pre aplikácie a chemické procesy v extrémnych podmienkach - Etapa II na základe podpory operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja. Autori taktiež ďakujú Agentúre na podporu výskumu a vývoja za financovanie v rámci projektu APVV-0109-10 a Grantovej agentúre VEGA za financovanie v rámci projektu 2/0074/10.

[1] Nair L. S., Laurencin C. T.: Prog. Polym. Sci., 32 (2007), 762.

[2] [Lukáč I., Kósa Cs.: Macromol. Rapid Commun., 15 (1994), 929.

3P05 NOVEL APPROACH TO THE SEPARATION AND MOLECULAR CHARACTERIZATION OF POLYMER SYSTEMS – SEQUENCED TWO- DIMENSIONAL LIQUID CHROMATOGRAPHY

Alena Šišková, Dušan Berek

*Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences,
Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava,
dusan.berek@savba.sk*

Many modern polymeric materials exhibit multiple distributions of their molecular characteristics, which are molar mass, chemical structure and/or physical architecture. Comprehensive molecular characterization of complex polymer systems represents an analytical challenge.

In this contribution we will present the combination of liquid chromatography under limiting condition of desorption, LC LCD with gel permeation chromatography, GPC, called

sequenced two-dimensional polymer liquid chromatography, 2SD-LC.

LC LCD enables efficient and molar mass independent separation of numerous multicomponent complex polymer systems according to chemical composition of constituents. Whole fractions produced by LC LCD are on-line forwarded into GPC column, in which molar mass averages and distributions of constituents are determined. The practical applications of S2D-LC will be presented, separation and characterization of two- and three-component polymer blends and assessment of both parent homopolymers from diblock copolymers.

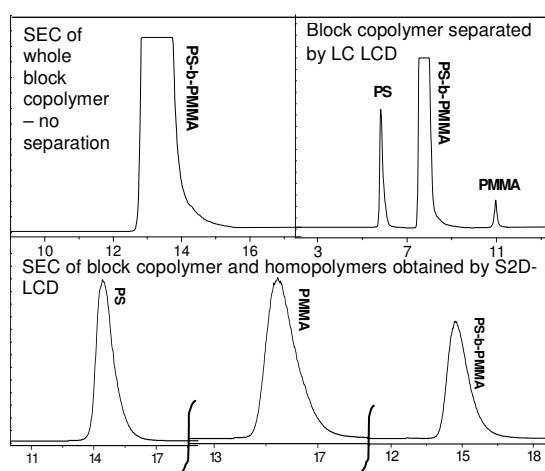


Fig. 1. Typical example of separation and characterization of parent homopolymers from block copolymer is shown. GPC does not enable the separation of particular constituents of polymer system. LC LCD separates three constituents of complex polymer system and S2D-LC furnishes average values of molar mass and distributions of constituents of complex polymer system.

This work was supported by the Slovak Grant agency VEGA, project 2/0171/09, and by the Slovak Research and Development Agency, APVV project 0109-10.

[1] Dušan Berek, Macromol Chem Phys, 209, 2213 (2008).

[2] [Dušan Berek, Anal Bioanal Chem 396, 421 (2010).

[3] Dušan Berek, Alena Šišková, Macromolecules 43, 9627, (2010).

3P06
SYNTHESIS, PROPERTIES AND
APPLICATION OF HIGHLY STERICALLY
HINDERED BINAPHTHALENE-BASED
MONOPHOSPHANE LIGANDS

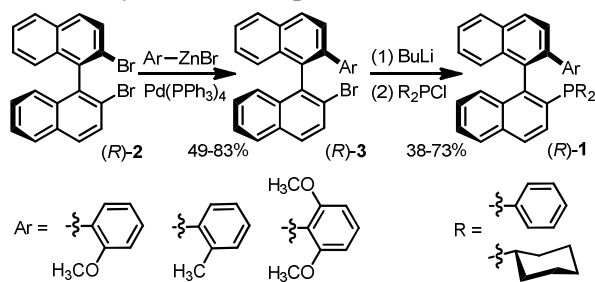
Michaela Mešková, Martin Putala*

Department of Organic Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University in Bratislava, Mlynská dolina, 845 12 Bratislava, Slovak Republic, putala@fns.uniba.sk

The sterically hindered monophosphane ligands belong to the most universal ligands in transition metal catalysed organic reactions, for example cross-coupling reactions [1]. Axial chirality of binaphthyl moiety can be explored to achieve asymmetric induction in catalyzed reactions. We focused on the preparation of bulky binaphthalene-based phosphane ligands **1** and their application in asymmetric catalysis.

We tested several approaches to prepare target ligands **1**. The optimized approach starts from enantiopure dibromide **2** via Negishi cross-coupling reactions with corresponding phenylzincium salts, allowing to introduce bulky groups onto this sterically hindered substrate just to the position 2. The new chiral ligands **1** were prepared by treatment of monoarylated bromides **3** with *n*-BuLi followed by PPh₂Cl or PCy₂Cl in good yields.

Application of the ligands **1** in stereoselective Suzuki reaction afforded chiral biaryls in good to excellent yields and in up to 70 % ee.



[1] S. D. Walker, T. E. Barder, J. R. Martinelli, S. L. Buchwald, *Angew. Chem., Int. Ed.* 2004, 43, 1871-1876.

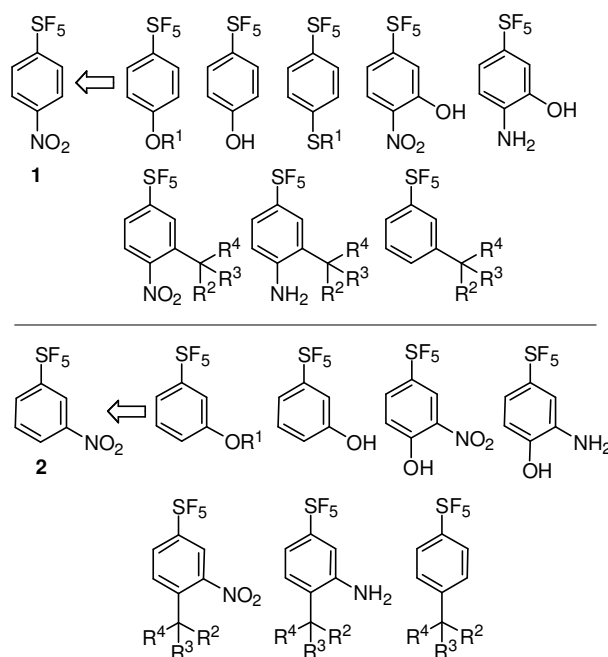
3P07
NEW ROUTE TOWARDS
(PENTAFLUOROSULFANYL)BENZENES

Petr Beier¹, George Jakobson¹, Norbetr Vida¹,
 Tereza Pastýříková¹

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

The interest in life science and material industries in novel fluorine containing substituents is nowadays prevalent. One of such fluorine containing groups which has gained considerable attention recently, mainly in crop science and liquid crystal industries, is the pentafluorosulfanyl group. The SF₅ group brings about an unusual combination of properties to organic compounds such as high lipophilicity and strong electron withdrawing character with high thermal and hydrolytic stability. However, the lack of good synthetic routes available for the preparation of these compounds and inaccessibility of basic building blocks are currently the main constraints to the exploration of chemistry and development of applications of compounds with the SF₅ group.

We have developed new synthetic methodologies towards various SF₅-benzene derivatives starting from nitrobenzenes **1** and **2**. Employing nucleophilic aromatic substitution for the nitro group or vicarious nucleophilic substitution for hydrogen we have shown access to a number of selectively substituted SF₅-benzenes shown in Fig. 1 [1–3].



R¹ = alkyl, aryl
 R² = H, alkyl, halogen
 R³ = halogen, SO₂R, CN, CO₂R, P(O)(OR)₂, pyridyl, etc.
 R⁴ = H, alkyl, alkenyl, benzyl, etc.

Fig. 1.

These compounds can be used as intermediates (basic building blocks) in the synthesis of various SF₅-benzenes, which can find applications in novel polymers, liquid crystalline materials, agrochemicals, and pharmaceuticals.

Support of this work from the Academy of Science of the Czech Republic (Research Plan AVZ40550506) is gratefully acknowledged.

- [1] Petr Beier, Tereza Pastýřiková, Norbert Vida, Georgie Iakobson: *Org. Lett.*, (2011) 13, 1466–1469.
 [2] Petr Beier, Tereza Pastýřiková, Georgie Iakobson: *J. Org. Chem.* (2011) in press.
 [3] Petr Beier, Tereza Pastýřiková: submitted (2011).

3P08 STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA MYCESTERICÍNOV D-G

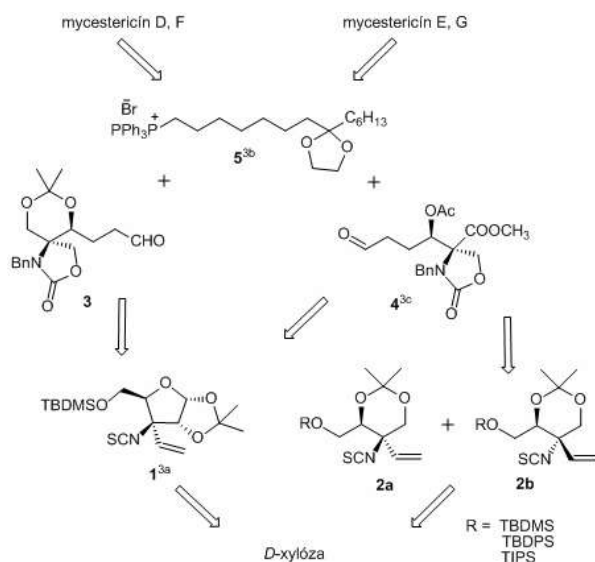
Alena Uhríková¹, Beáta Oroszová², Margaréta Kováčová¹, Simona Podolínska¹, Jana Špaková Raschmanová¹, Miroslava Martinková¹, Jozef Gonda¹

¹ Univerzita P. J. Šafárika, Prírodovedecká Fakulta, Ústav chemických vied, Katedra organickej chémie, Moyzesova 11, Košice, Slovenská republika, ali.uhrikova@gmail.com

² Vysoká škola chemicko-technologická, Fakulta potravinářské a biochemické technologie, Ústav chemie přírodních látek, Technická 5, Praha, Česká republika

Imunosupresívne látky zohrávajú dôležité úlohy pri transplantácií orgánov a pri liečení autoimunitných ochorení takých ako reumatická artritída, psoriáza. [1] Mycestericíny D, E, F a G boli izolované zo živnej pôdy huby *Mycelia sterilia* [2a] a reprezentujú minimálne 24-člennú skupinu sfingoidných zlúčenín [2b]. Tieto fungálne metabolity vykazujú pozoruhodnú imunosupresívnu aktivitu [2c], inhibujú serínpalmitoyltransferázu (enzým podieľajúci sa na biosyntéze sfingolipidov) [2d] a potláčajú proliferáciu lymfocytov [2e].

V predkladanom príspevku je popísaná stereoselektívna syntéza mycestericínov D, E, F, G. Kľúčovým krokom pre syntetickú stratégiu je vybudovanie tetrasubstituovaného uhlíka s dusíkovým atómom s požadovanou konfiguráciou pomocou *aza*-Claisenovho prešmyku za vzniku chirálnych izotiokyanátov **1** [3a], **2a**, **2b** (Obr. 1), ktoré boli vhodnou sekvenciou reakčných krokov modifikované na polárny fragment **3** mycestericínov D, F a polárnu časť **4** [3c] mycestericínov E, G. Wittigovou reakciou s príslušnou fosfóniovou soľou **5** [3b] a následnou finalizáciou boli získané cieľové molekuly mycestericínov D, E, F a G v chránených formách.



Obr. 1: Retrosyntetická analýza prípravy mycostericínov.

Tento príspevok vznikol s podporou Grantovej agentúry (No. 1/0100/09 a No. 1/0433/11) Ministerstva školstva Slovenskej Republiky a Vnútroštruktúrneho vedeckého Grantového systému UPJŠ (VVGS UPJŠ 19/10-11).

- [1] a) Fujita, T.; Hirose, R.; Yoneta, M.; Sasaki, S.; Inoue, K.; Kiuchi, M.; Hirase, S.; Chiba, K.; Sakamoto, H.; Arita, M. *J. Med. Chem.* 1996, 39, 4451-4459; b) Kiuchi, M.; Adachi, K.; Kohara, T.; Minoguchi, M.; Hanano, T.; Aoki, Y.; Mishina, T.; Arita, M.; Nakao, N.; Ohtsuki, M.; Hoshino, Y.; Teshima, K.; Chiba, K.; Sasaki, S.; Fujita, T. *J. Med. Chem.* 2000, 43, 2946-2961.
- [2] a) Fujita, T.; Hamamichi, N.; Kiuchi, M.; Matsuzaki, T.; Kitao, Y.; Inoue, K.; Hirose, R.; Yoneta, M.; Sasaki, S.; Chiba, K. *J. Antibiot.* 1996, 49, 846-853; b) Byun, H-S.; Lu, X.; Bittman, R. *Synthesis* 2006, 2447-2474; c) Sasaki, S.; Hashimoto, R.; Kiuchi, M.; Inoue, K.; Ikumoto, T.; Hirose, R.; Chiba, K.; Hoshino, Y.; Okumoto, T.; Fujita, T. *J. Antibiot.* 1994, 47, 420-433; d) Hanada, K. *Biochim. Biophys. Acta* 2003, 1632, 16-30; e) Yamanaka, H.; Sato, K.; Sato, H.; Iida, M.; Oishi, T.; Chida, N. *Tetrahedron* 2009, 65, 9188-9201 a práce tam citované.
- [3] a) Martinková, M.; Gonda, J.; Raschmanová, J. *Molecules* 2006, 11, 564-573; b) Payette, D. R.; Just, G. *Can. J. Chem.* 1981, 59, 269-282; c) Martinková, M.; Gonda, J.; Uhríková, A.; Kováčová, M. *Chem. Pap.* 2011, 65, 527-535.

3P09 PRÍPRAVA KONCENTROVANÉHO DICYKLOHEXYLAMÍNU PRI VÝROBE CYKLOHEXYLAMÍNU Z ANILÍNU V KVAPALNEJ FÁZE NA RUTÉNIOVOM KATALYZÁTORE

Ján Uhlár, Ivan Mačák, Milan Králik, Michal Štefanko

Výskumný ústav chemickej technológie Bratislava, Nobelova 34, 83603 Bratislava, Slovensko

Katalytická hydrogenácia anilínu na cyklohexylamín sa obyčajne uskutočňuje v kvapalnej alebo plynnej fáze na príslušnom katalyzátore. Pri vlastnej hydrogenácii, prebieha v systéme niekoľko následných a vedľajších chemických reakcií, výsledkom ktorých je rektifikáciou získaný vysoko koncentrovaný cyklohexylamín a podľa selektivity hydrogenačného katalytického systému aj významné množstvo nežiadaneho dicyklohexylamínu, sprevádzané určitým množstvom produktov vedľajších a následných reakcií, ktoré svojimi fyzikálnochemickými vlastnosťami neumožňujú rektifikáciou získať dicyklohexylamín o koncentrácii vyššej ako 99 % hmot.. Predmetná práca obsahuje súbor experimentov následnej hydrogenácie koncentráty dicyklohexylamínu z výroby cyklohexylamínu z anilínu v kvapalnej fáze na ruténiovom katalyzátore na nosiči alumina alebo uhlie, spočívajúci v tom, že sa viacnásobnou rektifikáciou reakčnej zmesi získaný koncentrovaný dicyklohexylamín opätovne katalyticky na kovovom (Ru,Pd,Pt,Rh) katalyzátore na nosiči, pri teplote 80 až 240 °C a tlaku 0,1 až 9,0 MPa hydrogenuje v tom istom, alebo inom hydrogenačnom zariadení, čím sa získa viac ako 99,0 % hmot. koncentrovaný dicyklohexylamín.

Práca bola podporovaná Ministerstvom školstva, vedy, výskumu a športu SR v zastúpení Agentúrou Ministerstva školstva, vedy, výskumu a športu SR pre štrukturálne fondy EÚ, projekt: Hydrogenácie v kvapalnej fáze, ITMS kód projektu. Práca bola vykonaná s podporou slovenskej agentúry pre výskum a vývoj a Duslo Šaľa v rámci projektu 26220220144, Aktivita 3.1: Výskum hydrogenácie aromatických dusíkatých zlúčenín s dôrazom na prenos výsledkov z laboratórneho do priemyselného meradla v rámci operačného programu Výskum a Vývoj ako aj Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APVV-0446-07.

- [1] Uhlár J., Mačák I., Štefanko M., Králik M., Horák J., Chovanec Š., Bíro P. a Brežný B.: SK PP – 500 35-2010.

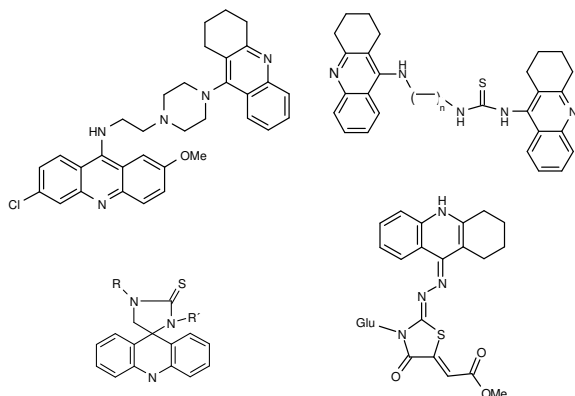
3P10 NOVEL ACRIDINES WITH ANTITUMOR AND ANTICHOLINESTERASE ACTIVITY

Ján Imrich, Slávka Hamuľáková, Ladislav Drajna, Lucia Maľučká, Mária Vilková, Marianna Vargová, Ladislav Janovec, Mária Vojtičková

¹Department of Organic Chemistry, ²Department of Biochemistry, Institute of Chemistry, Faculty of Science, P.J. Šafárik University, Moyzesova 11, SK-04167 Košice, Slovak Republic, jan.imrich@upjs.sk

³Department of Biochemistry and Microbiology, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak Technical University, Radlinského 9, SK-81237 Bratislava, Slovak Republic

Acridine derivatives are potent DNA-binding, antitumor, and anti-Alzheimer's disease agents [1]. Acridine-tacrine heterodimers and tacrine-tacrine homodimers possessing an ethylene-piperazine or (ethylene)_n-thiourea tether ($n = 1,2,3$), prepared from proper 9-chloroacridine and 1,2,3,4-tetrahydroacridine precursors, were evaluated as novel human acetylcholinesterase (*hAChE*) and butyrylcholinesterase (*hBuChE*) inhibitors with nanomolar inhibition activity and studied also by docking into the crystal structure of *hAChE* [2]. New spiroacridine derivatives were synthesized from *N*-alkyl-*N*-(acridin-9-ylmethyl)amine and isothiocyanates via thiourea intermediates which rapidly spirocyclized to new heterocyclic structures, spiro[acridin-9',5'-imidazolidin]-2-thiones. Glycoconjugates of Glu-, Gal-, and Man-isothiocyanates bound to tacrine via thiosemicarbazide linker were let to react with methyl bromoacetate, bromoacetyl bromide, and dimethyl acetylenedicarboxylate to give appropriate thiazolidinone products showing marked anticholinesterase efficacy. Assignments of their NMR chemical shifts were performed using COSY, TOCSY, NOESY, gHSQC, and gHMBC methods including ¹H, ¹⁵N-gHMBC.



Financial support from the Slovak Grant Agency VEGA (grant No. 1/0672/11) and the State NMR

Program (grant No. 2003SP200280203) is gratefully acknowledged.

- [1] Janovec, L.; Kožurková, M.; Sabolová, D.; Ungvarský, J.; Paulíková, H.; Plíšková, J.; Vantová, Z.; Imrich, J.: *Bioorg. Med. Chem.* 19, 1790-1801 (2011).
[2] Hamuľáková, S.; Imrich, J.; Janovec, L.; Kristian, P.; Danihel, I.; Holas, O.; Pohanka, M.; Böhm, S.; Kožurková, M.; Kuča, K: To be submitted (2011).

3P11 STUDIUM FÁZOVÉHO PŘECHODU KLUBKO-GLOBULE VE VODNÝCH ROZTOCÍCH TERMORESPONZIVNÍCH POLYMERŮ NMR METODAMI

Jiří Spěváček

Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i.,
Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6,
spevacek@imc.cas.cz

Je známo, že termoresponzivní polymery vykazují ve vodném roztoku přechod klubko-globule doprovázený agregací a tvorbou tzv. mesoglobulí. Termosenzitivita činí tyto polymery zajímavé pro různé biolékařské a technologické aplikace, např. jako polymery pro uvolňování léčiv.

Tvorba globulárních struktur vede u většiny polymerních segmentů k markantnímu rozšíření NMR signálů [1]. Z integrovaných intenzit v NMR spektrech vysokého rozlišení je možné stanovit hodnoty podílu monomerních jednotek s podstatně redukovanou pohyblivostí a následně např. termodynamické parametry (ΔH , ΔS) fázového přechodu. U D₂O roztoků statistických kopolymerů poly(*N*-isopropylmethakrylamid – akrylamid) [P(IPMAm/AAM)] jsme pomocí NMR spektroskopie zjistili, že v příslušných mesoglobulích jsou oblasti, kde jsou jak hydrofilní AAm sekvence (jednotky) tak je obklopující IPMAm sekvence hydratovány a tudíž pohyblivé [2].

Chování vody během fázového přechodu jsme studovali zejména u D₂O roztoků polyvinylmetyleteru (PVME). Měření ¹H spin-spinové relaxace ukazují, že v semizředěných roztocích je část molekul HDO vázána v mesoglobulích, přičemž dochází k rychlé (ms) výměně mezi vázanou a volnou vodou. Naproti tomu z ¹H NOE NMR experimentů vyplývá, že u vysoce koncentrovaných roztoků PVME ($c = 20$ -60 váh.%) je výměna mezi vázanou a volnou vodou o 3 řády pomalejší [3]. Tyto výsledky je možné vysvětlit difuzí molekul vody

mesoglobulemi a řádově odlišnou velikostí mesoglobulí v obou případech.

Autor děkuje za podporu GA ČR (projekt 202/09/1281).

- [1] J. Spěváček, Curr. Opin. Colloid Interface Sci. 14, 184 (2009).
 [2] H. Kouřilová, J. Šťastná, L. Hanyková, Z. Sedláková, J. Spěváček, Eur. Polym. J. 46, 1299 (2010).

3P12 RÖNTGENOVÁ FOTOELEKTRONOVÁ SPEKTROSKOPIA A MOŽNOSTI JEJ VYUŽITIA

Mária Omastová, Matej Mičušík

Vedecké a demonstračné laboratórium, Ústav polymérov, SAV v spolupráci s Thermo Fisher Scientific, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, maria.omastova@savba.sk

Röntgenová fotoelektronová spektroskopia (XPS) tiež známa ako ESCA – Elektronová spektroskopia pre chemickú analýzu je jednou z najkomplexnejších techník na charakterizáciu chemického zloženia povrchov materiálov. Pri XPS metóde je vzorka vo forme prášku alebo filmu pri ultravysokom vákuu bombardovaná röntgenovým lúčom fotónov a následne sú detekované rýchlosti vyrazených elektrónov z vrchných vrstiev materiálu. Každý atóm má svoju charakteristickú rýchlosť vyrazeného elektrónu, navyše je rýchlosť ovplyvnená aj zapojením sa daného atómu do chemických väzieb a pomocou vysokorozlíšených spektier sa dajú priradiť tieto chemické posuny a určiť tak konkrétne chemické skupiny. Hĺbka z ktorej sa detekujú elektróny je len niekoľko nanometrov (2-10 nm) čo zaručuje, že získané informácie sú výhradne o chemickom zložení povrchu.

Informácia o presnom zložení povrchov je užitočná pri skúmaní korózie kovov aj v ďalších technologických oblastiach ako je katalýza a metalurgia. Využíva sa pri skúmaní únavy materiálov, aj pri vývoji nových kompozitných materiálov, v textilnom primysle, pri výrobe skla, lepení atď.

XPS prístroj K-Alpha, ktorý je inštalovaný na Ústave polymérov SAV je prvým komerčným prístrojom tohto druhu na Slovensku. V príspevku predstavíme niekoľko príkladov využitia tejto metódy pri skúmaní povrchovej modifikácie polymérov a uhlíkových nanotrubičiek.

Príspevok bol vytvorený realizáciou projektu Centrum pre Materiály, vrstvy a systémy pre aplikácie a

chemické procesy v extrémnych podmienkach - Etapa II na základe podpory operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja.

3P13 VÍCESTUPŇOVÉ SMĚROVÁNÍ AUGEROVA ZÁŘIČE ¹²⁵I DO DNA NÁDOROVÝCH BUNĚK POMOCÍ POLYMERŇÍHO NOSIČOVÉHO SYSTÉMU

Martin Hrubý^{1*}, Ondřej Sedláček¹, Martin Studenovský¹, Jan Kučka¹, David Větvička², Lubomír Kovář², Karel Ulbrich¹

¹Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6, Česká republika, e-mail: mhruby@centrum.cz, tel: +420 296 809 230, fax: +420 296 809 410

²Mikrobiologický ústav AV ČR, v.v.i., Vídeňská 1083, 142 20 Praha 4, Česká republika

Augerovy elektróny predstavujú biologicky mimořádně účinné ionizující záření s velmi krátkým dosahem (typicky pod 100 nm). Pro efektivní použití v radioterapii je proto nutné Augerovy zářiče dopravit do buňky a ideálně do DNA jako primárního cíle radioterapie. Připravili a charakterizovali jsme [1] polymerní nosičový systém navržený pro cílenou radioterapii pevných nádorů s minimalizací radiačního poškození zdravých tkání využívající vícecestupňové směrování: Polymerní konjugát je díky své molekulové hmotnosti směrován EPR efektem do nádorové tkáně, kde dojde k pH-řízenému uvolnění ¹²⁵I-značeného interkalátoru. Tento interkalátor pak dopraví radionuklid do DNA v jádře buňky. Systém je založen na 2-N-(2-oxobutyl)-9-iodoellipticinium bromidu (OIE) značeném ¹²⁵I navázaného hydrazonovou hydrolyticky labilní vazbou na poly[N-(2-hydroxypropyl)methakrylamid] s hydrazidovými funkčními skupinami. Systém je zcela stabilní při pH 7,4 (model krevní plazmy), zatímco při pH 5,0 modelujícím endosom je uvolněn OIE (25 % za 24 h při 37°C). Volný OIE je velmi silným interkalátorem snadno proniká buněčnými membránami do jaderné DNA. Jeho polymerní konjugát je nejprve internalizován do endosomů, kde uvolní interkalátor a ten je posléze akumulován v jádře buňky. Neradioaktivní OIE si zachovává chemoterapeutickou účinnost ellipticinu s IC₅₀ pro různé buněčné linie v rozmezí 0.27 - 8.8 μmol/L.

Autoři děkují za finanční podporu Grantové agentury České republiky (grant č. P207/10/P054), Grantové agentury Akademie věd české republiky (grant č.

IAAX00500803) a Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy (grant č.# IM4635608802).

[1] O. Sedláček, M. Hrubý, M. Studenovský, J. Kučka, D. Větvicka, L. Kovář, B. Řhová, K. Ulbrich, *Bioconjugate Chem.*, in press, DOI: 10.1021/bc200064v.

3P14 ORGANIC FIELD EFFECT TRANSISTORS FROM TRIARYLAMINE SUBSTITUTED ARYLENE BISIMIDES

Renata Rybakiewicz^{1*}, Renji R. Reghu², David Djurado³, Hubert Cybulski⁴, Juozas V. Grazulevicius², Irena Kulszewicz-Bajer¹, Damien Boudinet⁵, Jean-Marie Verilhac⁵, Malgorzata Zagorska¹, Adam Pron³

¹Faculty of Chemistry, Warsaw University of Technology, 00664 Warszawa, Poland, *e-mail: renatarybakiewicz@gmail.com

²Department of Organic Technology, Kaunas University of Technology, LT-50254, Kaunas, Lithuania

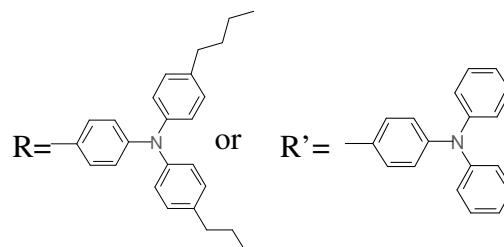
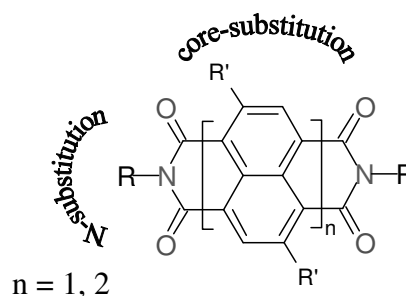
³INAC/SPrAM (UMR 5819, CEA-CNRS-Univ. J. Fourier-Grenoble 1)LEMOH, CEA Grenoble, France

⁴Department of Physical Chemistry, University of Santiago de Compostela, Spain

⁵CEA/LITEN/LCI, Grenoble, France

Low and high molecular weight organic semiconductors are used in the fabrication of different types of electronic devices like light emitting diodes (LEDs),¹ photovoltaic cells (PCs)² or field effect transistors (FETs).³ The unique electronic and optoelectronic properties of these materials resulted in the continuously increasing research interest in the field of organic electronics.

The main goal of this work was to synthesize a new class of organic semiconductors suitable for the fabrication of ambipolar field effect transistors, namely arylene bisimides N- or core-functionalized with triaryl amine substituents. Electrochemical and spectroelectrochemical investigations, as well as DFT calculations, unequivocally indicated that in these bisimides the HOMO and LUMO levels are appropriately positioned to yield air operating ambipolar transistors. However a strong effect of the substituent position on the electrical properties of these semiconductors was observed – core-substituted compounds yielded ambipolar transistors whereas the N-substituted ones showed the field effect only in the p-channel configuration.



- [1] Lo, S.C.; Burn, P.L. *Chem. Rev.* 2007, 107, 1097-1116.
 [2] Cheng, Y.J.; Yang, S. H.; Hsu C.S. *Chem. Rev.* 2009, 109, 5868-5923.
 [3] Pron, A.; Gawrys, P.; Zagorska, M.; Djurado, D.; Demadrille, R. *Chem. Soc. Rev.* 2010 39, 2577-2632.

3P15 PROMĚNY MOLEKULÁRNÍ STRUKTURY POLYANILINEM POKRYTÝCH UHLÍKOVÝCH NANOTRUBEK V PRŮBĚHU KARBONIZACE

Zuzana Rozlívková, Elena N. Konyushenko, Miroslava Trchová, Jaroslav Stejskal

Ústav Makromolekulární chemie, UV ČR, Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6, Česká Republika

Uhlíkové nanotrubky jsou velmi studovaným materiálem díky svým elektrickým a mechanickým vlastnostem. Lze je použít v mnoha aplikacích jako jsou katalýza, palivové články a senzory. Fyzikální vlastnosti uhlíkových materiálů jsou velmi citlivé na obsah heteroatomů, obzvláště dopování dusíkem je věnována mimořádná pozornost díky možným elektronickým i katalytickým aplikacím. Takové dusíkem dopované uhlíkové materiály lze získat např. pyrolýzou polymerů obsahujících dusík v hlavním řetězci. Velmi vhodnými kandidáty pro karbonizaci jsou vodivé polymery. Námi studovaný polyanilin (PANI) lze vyrobit v různých morfológiích (granulární, nanotubulární, tenké vrstvy a pokrytí), které se při karbonizaci zachovávají.

V této práci jsme pokrývali mnohostěnné uhlíkové nanotrubky (MWCNT) PANI ve

směsném rozpouštědle voda/ethanol a následně zahřívali na 650 oC v dusíkové atmosféře [1]. Výsledný produkt jsme studovali infračervenou a Ramanovou spektroskopií.

MWCNT pokryté PANI solí byly stabilnější než nepokryté MWCNT i MWCNT pokryté PANI bázi, které měly po karbonizaci vyšší obsah dusíku. Ochranné vlastnosti PANI proti vysokým teplotám byly pozorovány již dříve [2]. Studovali jsme i vliv ethanolu na karbonizaci samotného PANI, PANI sůl připravená za přítomnosti ethanolu je po karbonizaci mnohem uspořádanějším materiálem, než bylo doposud pozorováno.

- [1] Trchová M, Konyushenko EN, Stejskal J, Kovářová J, Čirić-Marjanović G. The conversion of polyaniline nanotubes to nitrogen-containing carbon nanotubes and their comparison with multi-walled carbon nanotubes. *Polym Degrad Stab*; 94, 929–38 (2009).
- [2] Stejskal J, Trchová M, Sapurina I. Flame-retardant effect of polyaniline coating deposited on cellulose fibers. *J App Polym Sci.*, 98, 2347–54 (2005).
- [3] J. Spěváček, L. Hanyková, J. Labuta, *Macromolecules* 44, 2149 (2011).

3P16 PHOTOACTUATING NANOCOMPOSITES BASED ON BLOCK COPOLYMERS AND COVALENTLY MODIFIED MULTIWALLED CARBON NANOTUBES

Markéta Ilčíková^{a,1}, Miroslav Mrlík^{b,c}, Dušan Chorvát^d, Matej Mičušík^a, Tomáš Sedláček^{b,c}, Katarína Csomorová^a, Jaroslav Mosnáček^a

^a*Polymer Institute, Centre of Excellence GLYCOMED, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, Slovakia, ¹upolmail@savba.sk*

^b*Polymer Centre of Faculty of Technology, Tomas Bata University in Zlín, nám T.G. Masaryka 275, 762 72 Zlín, Czech Republic*

^c*Centre of Polymer systems, University Institute, Tomas Bata University in Zlín, Nad Ovčírnu 3685, 760 01 Zlín, Czech Republic*

^d*International Laser Centre, Ilkovičova 3, 841 04, Bratislava, Slovakia*

Since their discovery, carbon nanotubes (CNT) have attracted particular attention for their unique structural, mechanical and electrical properties. However, thank to strong van der Waals interactions, CNT tend to aggregate, what results in not uniform CNT dispersion limiting their potential applications. Functionalization of CNT with long molecules and polymer chains enables suppressing the interactions between CNT and their aggregation.

In this work, Nanocyl multiwall carbon nanotubes (MWCNT) were covalently modified in order to improve their dispersability in various thermoplastic elastomers. The modified MWCNT were characterized by various techniques, such as SEM, TEM, TGA, and FTIR. The composite films were prepared by casting of toluene solution containing styrene-isoprene-styrene (SIS) block copolymer and various amount of MWCNT. The modification significantly improved dispersion of carbon nanotubes in SIS. The best dispersion was observed when 0.1 wt. % of MWCNT-PS was used. The mechanical and rheological properties of prepared composites were studied. In addition photoactuation of the composites was studied as well.

This contribution is the result of the project implementation: Centre for materials, layers and systems for applications and chemical processes under extreme conditions Stage II supported by the Research & Development Operational Programme funded by the ERDF, the European Commission within 7th Frame Program (project NOMS, contract no. 228916). The authors also thank for the financial support of the Slovak Research and Development Agency APVV through Grant APVV-0109-10 and Operational Program Research and Development for Innovations co-funded by the European Regional Development Fund and national budget of Czech Republic, within the framework of project Centre of Polymer Systems (CZ.1.05/2.1.00/03.0111).

3P17 ANTITUBERKULOTIKA 21. STOLETÍ

Jarmila Vinšová

Farmaceutická fakulta UK, Heyrovského 1203, Hradec Králové, Česká republika. vinsova@faf.cuni.cz

Tuberkulóza (TB) je infekční onemocnění, které se šíří podobně jako obyčejné nachlazení kapénkovou nákazou. Původně se předpokládalo, že bude do r. 2015 vymýcena, ale bohužel k tomu dosud nedošlo v žádné zemi světa. Podle WHO je jedna třetina obyvatelstva infikována *Mycobacterium tuberculosis*, ročně onemocní 8,8 milionů lidí a 1.7 milionů na ni zemře [1].

Zatímco běžné případy tuberkulózy jsou dosud léčitelné, MDR-TB (rezistentní na isoniazid a rifampicin) a XDR-TB (rezistentní vůči první linii antituberkulotik, fluorochinolonům a jednomu z injekčně podávaných antituberkulotik) přináší vážné problémy.

Směry současného výzkumu zahrnují přípravu a testování zcela nových struktur, modifikace známých molekul, zkoumání přírodních látek,

kombinace léčiv za účelem zkrácení doby léčení, vývoj lékových forem s postupným uvolňováním aktivní látky, což umožní snížení frekvence podávání a velikosti dávek.

Byly nalezeny nové cíle působení, připraveny nadějně struktury, tzv. „leads“, např. nitroimidazoly PA-824 a OPC-67683, diarylchinolin TMC207, dále linezolid, terpenoid SQ109, sulfonylacetamid FAS20013 a pyrroly LL-3858 a BM212 [2].

Cílová místa zahrnují syntézu DNA, RNA, buněčné stěny či dráhy energetického metabolismu. Nové sloučeniny zasahují do syntézy mykologických kyselin, působí jako inhibitory proteinové syntézy a biosyntézy polysacharidů. Pro boj s latentní infekcí je cílovým enzymem např. isocitrát lyasa, pro buněčné dělení u bakterií je důležitý termosenzitivní filamentární protein.

Práce vznikla s podporou grantu IGA NS 10367-3 a MSM 0021620822.

[1] <http://www.who.int/topics/tuberculosis/en/>

[2] Vinsova J., Kratky M.: Tuberculosis - The Development of New MDR-TB Drugs (kapitola v knize Drug-Resistant Tuberculosis). Nova Science Publishers, 2009, New York.

3P18

COILED COIL MOTIV JAKO UNIVERZÁLNÍ SPOJKA PRO VAZBU REKOMBINANTNÍCH PROTEINŮ NA POLYMERNÍ LÉČIVA

Michal Pechar¹, Robert Pola¹, Karel Ulbrich¹, Lucie Bednářová², Petr Maloň², Vlastimil Král³, Irena Siegllová³, Milan Fábry³, Ondřej Vaněk⁴, Martina Kabešová⁵, Luboš Kovář⁵

¹Ústav makromolekulární chemie, AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6, pechar@imc.cas.cz

²Ústav organické chemie a biochemie, AV ČR, v.v.i., Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha 6

³Ústav molekulární genetiky, AV ČR, v.v.i., Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha 6

⁴Katedra biochemie, Přírodovědecká fakulta UK, Hlavova 8, 128 40 Praha 2

⁵Mikrobiologický ústav, AV ČR, v.v.i., Vídeňská 108, 142 20 Praha 4

Nadmolekulární uspořádání syntetických i přírodních polymerů je možné využít pro přípravu nových materiálů s přesně definovanými vlastnostmi, vhodnými např. pro cílený transport a uvolňování léčiv.

Byly navrženy a připraveny peptidy o délce 28 aminokyselin, které ve vodném roztoku asociují za vzniku „coiled coil“ heterodimerů složených ze dvou α -helixů. Zatímco jednotlivé peptidy zaujmají v roztoku konformaci náhodného klubka, jejich ekvimolární směs vede ke vzniku „coiled coil“ heterodimeru. Toto chování bylo potvrzeno pomocí spektroskopie cirkulárního dichroismu, rozměrově vylučovací chromatografie, sedimentační analýzy a izotermální titrační kalorimetrie. Peptidy tvořící „coiled coil“ dimer obsahují čtyři heptády VAALKEE (peptid E) a VAALKEK (peptid K). N-Konce obou peptidů byly modifikovány 5-azidopentanovou kyselinou navázanou přes tetraethylenglykolovou spojku. Azidoskupina umožnila navázání peptidů na syntetické kopolymery na bázi N-(2-hydroxypropyl)methakrylamidu nesoucí propargylové skupiny pomocí „click“ chemie. Polymer nesoucí peptid E tvoří stabilní nekovalentní komplex s rekombinantním fragmentem protilátky M75 obsahujícím peptid K (scFv-K) díky tvorbě „coiled coil“ heterodimerů mezi peptidy E a K. Vazba komplexu polymer-scFv-K na karbonickou anhydrázu IX - receptor hojně zastoupený v různých nádorech - byla ověřena pomocí metody ELISA.

Tato strategie umožňuje nový nedestruktivní způsob připojení biologicky aktivních proteinů (pro směřování, diagnostiku či terapii) na polymerní léčiva.

Autoři děkují za podporu Grantové agentury České republiky (grant 203/08/0543).

[1] Yang, C. Xu, C. Wang and J. Kopeček, *Biomacromolecules* (2006) 7, 1187.

[2] M. Pechar, P. Kopečková, L. Joss and J. Kopeček, *Macromol. Biosci.* (2002) 2, 199.

[3] B. Apostolovic, M. Danial and H. A. Klok, *Chem.Soc.Rev.* (2010) 39, 3541.

3P19 HYDROGÉLY MODIFIKOVANÉ PEPTIDMI PRE ZLEPŠENIE IMUNOLOGICKEJ OCHRANY ENKAPSULOVANÝCH BUNIEK

Andrea Ďuračková¹, Slávka Bekešová², Ľudovít Škultéty², Igor Lacík¹

¹Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, andrea.durackova@savba.sk

²Virologický ústav SAV, Dúbravská cesta 9, 845 05 Bratislava

Základnou úlohou enkapsulačného materiálu je zaistenie ochranej bariéry pre transplantované pankreatické ostrovčeky, ktorá ich chráni pred imunitným systémom príjemcu. Súčasnú enkapsulačné materiály zabezpečujú fyzikálnu bariéru, avšak zatiaľ nie sú schopné účinne chrániť enkapsulované bunky pred špecifickými nízkomolekulovými imunoreaktívnymi látkami (cytokíny/chemokíny), ktoré cez ne prestupujú a tým ovplyvňujú životnosť buniek. Niekoľko príkladov [1,2] z minulého roka naznačuje, že je možné potlačiť imunitnú reakciu zameraním sa práve na tieto imunoreaktívne látky. Hlavným cieľom našej práce je modifikácia polymérneho enkapsulačného materiálu peptidmi inhibujúcimi účinkom cytokínov pre zlepšenie prežívania enkapsulovaných pankreatických buniek pri liečbe cukrovky.

Biologická modifikácia enkapsulačného materiálu otvára nové cesty, ktoré môžu viesť k redukcii poškodenia buniek vyvolanej špecifickými imunoreaktívnymi látkami.

Práca na tejto téme v rámci Ústavu polymérov SAV začala len v roku 2011 a v tomto príspevku je naša snaha predstaviť túto relatívne novú problematiku, ktorej riešenie môžeme rozdeliť do nasledujúcich cieľov:

- i. Syntéza afinitných peptidov Fmoc peptidovou syntézou na pevnom podklade a modifikácia polymérnych prekursorov (napr. alginátu sodného) afinitnými peptidmi.
- ii. Príprava a charakterizácia hydrogélů a mikrokapsúl modifikovaných afinitnými peptidmi.
- iii. *In vitro* testy enkapsulovaných buniek v novopripravených hydrogélůch a mikrokapsulách.

Doteraz boli zosyntetizované afinitné peptidy, ktorých štruktúra bola potvrdená sekvenáciou pomocou MS/MS analýzy na ESI-Q/TOF. Fotopolymerizáciou z PEG diakrylátu boli

pripravené referenčné hydrogély bez zabudovania buniek.

Táto práca je podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja, projekt č. APVV-0486-10 a Chicago Diabetes Project.

[1] Chien-Chi Lin, Patrick D. Boyer, Alex A. Aimetti, Kristi S. Anseth: *J. Control. Rel.* 142 (2010) 384-391.

[2] Jing Su, Bi-Huang Hu, William L. Lowe Jr., Dixon B. Kaufman, Phillip B. Messersmith: *Biomaterials* 31 (2010) 308-314.

3P20 „CLICK & SEED“ STRATEGIE BIOMIMETICKÉ MODIFIKACE MATERIÁLŮ

Vladimír Proks^{1*}, Josef Jaroš^{2,3}, Ognjen Pop-Georgievski¹, Jan Kučka¹, Štěpán Popelka¹, Aleš Hampl⁴, František Rypáček

¹ Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v. v. i. Heyrovského nám. 2, Praha 6, 162 00, proks@imc.cas.cz

² Centrum buněčné terapie a tkáňových náhrad, Ústav neurovědy, V Úvalu 84, Praha 5, 150 18

³ Ústav histologie a embryologie, Lékařská fakulta, Masarykova Univerzita, Kamenice 3, Brno 625 00

⁴ Ústav experimentální medicíny, AV ČR, v. v. i. Vídeňská 108, Praha 142 20

Kontrola buněčné adheze, diferenciace a proliferace je klíčový moment řady aplikací tkáňového inženýrství. Vhodné nastavení povrchových vlastností materiálů je tedy nezbytné pro dosažení efektivní interakce mezi buňkou a povrchem.

Zde je prezentována jednoduchá, protein-rezistentní a na typu materiálu nezávislá biomimetická modifikace povrchů. Strategie modifikace je založena na využití povrchové modifikace polydopamin-poly(ethylen oxid) protein-repuzivní vrstvou [1, 2]. Využití poly(ethylen oxidu) s alkyn koncovou skupinou umožňuje následnou biomimetickou modifikaci pomocí „click“ chemie[3]. Povrchová koncentrace biologicky aktivních skupin je řízena koncentrací ligandu v reakční směsi, množství imobilizovaného ligandu lze přesně stanovit s využitím ¹²⁵I radioznačených biomimetických peptidů.

Tesy buněčné adheze byly provedeny na substrátech modifikovaných RGDS a RDGS peptidy o povrchové koncentraci 10⁻¹³ a 10⁻¹¹ mol/cm² s využitím dvou buněčných linií s rozdílnými adhezivními a proliferačními

vlastnosťami, jmenovitě embryonální myší fibroblasty a lidské embrionální nádorové buňky. Selektivní adheze buněk na RGDS oproti RDGS peptidu byla pozorována pro koncentraci 4.10^{-13} mol/cm².

Prezentovaný “click&seed” přístup lze využit nejen pro přípravu různých typů modelových substrátů pro kultivace buněčných kultur, ale i pro univerzální modifikaci implantátů pro tkáňové inženýrství.

Práce vznikla za finanční podpory Grantové agentury Akademie věd České republiky č. KJB40050090 a Centra buněčné terapie a tkáňových náhrad (MŠMT, grant č. 1M0021620803).

- [1] Lee, H., Dellatore, S. M., Miller, W. M., and Messersmith, P. B.: *Science* 318, 426-430 (2007).
 [2] Pop-Georgievski, O., Popelka, Š., Houska, M., Chvostová, D., Proks, V., Rypáček, F.: *Biopolymers*, submitted.
 [3] Rostovtsev, V. V., Green, L. G., Fokin, V. V., and Sharpless, K. B.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 41, 2596-2599. (2002).

3P21

POLYETYLÉN UPRAVENÝ VYBRANÝMI ANTIBAKTERIÁLNÝMI LÁTKAMI S VYUŽITÍM NÍZKOTEPLNOTNEJ PLAZMY

Anton Popelka¹, Igor Novák¹, Marián Lehocký², Angela Kleinová¹, Milena Špírková³, Ivan Chodák¹

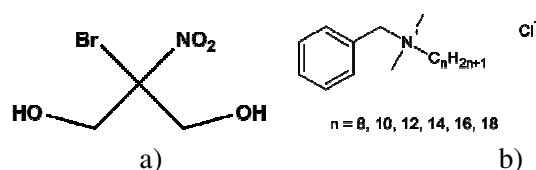
¹Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava 45, Slovensko, anton.popelka@savba.sk

²Centrum výzkumu zdravotnických materiálů, UTB ve Zlíně, 760 01 Zlín, Česká republika

³Ústav Makromolekulární Chemie, AV ČR, Heyrovského nám. 2 162 06 Prague 6, Czech Republic

Nízkohustotný polyetylen (LDPE) patří medzi najviac používané polyméry v priemyselných a biomedicínnych aplikáciach, avšak jeho nevýhodou je riziko kontaminácie baktériami [1]. Z hľadiska zvýšenia odolnosti LDPE proti baktériam je nevyhnutná jeho dodatočná povrchová úprava. Medzi vhodné metódy antibakteriálnej úpravy povrchu LDPE patrí naviazanie antibakteriálnych látok s využitím plazmy difúzneho koplánarneho povrchového bariérového výboja [2]. Povrchová úprava polymérnych povrchov nízkoteplotnou plazmou sa vo veľkej miere využíva v rôznych priemyselných odvetviach, týkajúcich sa elektrotechnického, leteckého, automobilového, biomedicínskeho, textilného, optického a

papierenského priemyslu. Ide o ekologický, čistý a suchý postup, bez nutnosti použitia chemikálií [3]. V tejto práci bol preskúmaný vplyv vybraných antibakteriálnych látok, konkrétne bronopolu (2-bromo-2-nitropropán-1,3-diolu) a benzalkónium chloridu (benzyl-dimetyl-tridecyl-azánium chloridu), ktoré sú znázornené na obr. 1., naviazaných na LDPE pomocou plazmy dielektrického povrchového bariérového výboja. Takáto povrchová úprava viedla k zlepšeniu povrchových vlastností a k zvýšeniu odolnosti proti baktériam Escherichia Coli a Staphylococcus Aureus, ktoré sú príčinou mnohých infekcií.



Obr. 1 Schéma: a) bronopol, b) benzalkónium chlorid

Táto práca vznikla za finančnej podpory grantu MŠ SR a SAV (projekt VEGA, č. 2/0185/10), Ministerstva školstva, mládeže a telovýchovy ČR (grant VZ MSM 7088352101 a grant MPO 2A-1TP1/126) a Ministerstva vysokého školstva, vedy a technológie Slovenska (program P2-0082-2).

- [1] Wei Zhang, Yunjun Luo, Huaiyu Wang, Jiang Jiang, Shihao Pu, Paul K. Chu: Ag and Ag/N2 plasma modification of polyethylene for the enhancement of antibacterial properties and cell growth/proliferation, *Acta Biomaterialia*, 4 (2008), 2028.
 [2] Ahmad Asadinezhad, Igor Novák, Marián Lehocký, František Bílek, Alenka Vesel, Ita Junkar, Petr Sába a Anton Popelka, *Molecules*, 15 (2010), 1007.
 [3] Geoff Lloyd, Gary Friedman, Syed Jafri, Greg Schultz, Alex Fridman, Keith Harding: *Plasma Process. Polym.*, 7 (2010), 194.

3P22

ENZYMATIC ACYLATIONS OF GLUCOSIDES BY PHENOLIC ACIDS AND THEIR ANALOGUES

Mária Mastihubová¹

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

Regioselective acylation of hydroxyls along the saccharide ring is constantly a fundamental challenge for carbohydrate organic chemists. The problem encountered in the chemical modification of sugar molecules may be avoided

by introduction of biocatalytic procedures possessing high degree of regioselectivity in the acylation of polyhydroxylated compounds [1]. Selective acylations of saccharides by phenolic acids under mild conditions are necessary for the synthesis of bioactive acylated natural glycosides (e. g. phenylpropanoid glycosides) [2].

Previously, a scale of commercial enzymes exhibiting feruloyl esterase activity has been tested in our laboratory for catalysis of transferuloylations on glycosides in organic solvents [3]. Lipolase 100T (immobilised lipase from *Thermomyces lanuginosus*) was found to be the best biocatalyst due to its ability to feruloylate different glycosides in acetonitrile.

This contribution presents results from our investigation of the reactivity of vinyl esters of several phenolic acids including *p*-hydroxylated derivatives of benzoic, phenylacetic, phenylpropionic and cinnamic acids as well as their non-phenolic analogues as donors. Both anomers of methyl D-glucopyranoside as model acceptors were acylated using Lipolase 100T. The regioselectivity, reaction rates and yields of studied acylations strongly depended on donor structure. Some correlation of reactivity and the structure of used donors will be therefore discussed.

- [1] Kadereit D., Waldmann H.: Chem. Rev. 101, 3367 (2001).
 [2] Pan J., Yuan C., Lin C., Jia Z., Zheng R.: Pharmazie 58, 767 (2003).
 [3] Mastihubová, M.; Mastihuba, M.; Bilaničová, D.; Boreková, M. J. Mol. Catal. B: Enzym., 38, 54 (2006).

3P23

ELEKTROCHEMICKÁ REDUKCE MOLEKUL S VÍCE REDOXNÍMI CENTRY: MONO-, DI-, TRI- A TETRANITROKALIX[4]ARENŮ A JEJICH MODELOVÉ NITROBENZENY

Alan Liška^{a,b}, Jiří Ludvík^c, Albert J. Fry^d

^aÚstav fyzikální chemie Jaroslava Heyrovského AV ČR, v.v.i., Dolejškova 3, 182 23 Praha 8, ČR, alanliška@centrum.cz

^bUniverzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Albertov 6, 128 43 Praha 2, ČR

^cÚstav fyzikální chemie Jaroslava Heyrovského AV ČR, v.v.i., Dolejškova 3, 182 23 Praha 8, ČR, jiri.ludvik@jh-inst.cas.cz

^dWesleyan University, Middletown, Connecticut, USA

Kalixarenový skelet je stabilní supramolekulární systém schopný nést různé substituenty – redoxní

centra nebo ligandy. Nabízí se zde též využití pro interakce host-hostitel. Zavedení nitroskupin na horní kruh umožňuje další elektrochemické prodloužení pendantních uhlíkatých řetězců.

Tyto polynitrosloucheniny představují tedy nejen prekursory pro další elektrosyntézu, ale také molekuly s více redoxními centry. Přítomnost jedné, dvou, tří nebo čtyř nitroskupin v jedné molekule nabízí řadu principiálních otázek: jaká je intramolekulární elektronová interakce mezi nimi; jsou redukovány současně nebo postupně; jaký má substituce na dolním kruhu vliv na redukci nitroskupin; jaký má vliv konformace kalix[4]arenu (*cone*, *partial cone*, *1,2-alt*, *1,3-alt*) na jeho redukovatelnost; jaký je vliv stupně redukce na geometrii molekuly; jaké jsou redukční meziprodukty a mechanismy v prostředí bezvodého DMF?

Před studiem samotných nitrokalix[4]arenů byly nejprve provedeny elektroredukční experimenty s řadou „monomerních“ modelových látek – *p*-substituovaných nitroaromátů – s cílem prozkoumat míru ovlivnění redoxního centra substituentem v *p*-poloze. U vybrané modelové látky a ještě u několika dalších členů série byl pozorován klasický mechanismus redukce (jednoelektronový reverzibilní děj následovaný tříelektronovým ireverzibilním), nicméně bylo pozorováno a popsáno též několik „anomálních“ redukčních mechanismů (tvorba biradikálového dianiontu, šestielektronová redukce, autoprotónizační mechanismus, uplatnění vodíkových vazeb).

Elektrochemická redukce tetranitrokalix[4]arenů začíná dvěma dvouelektronovými reverzibilními vlnami, které vypovídají o přítomnosti dvou různých dvojic ekvivalentních nitroskupin. Tento výsledek je v souladu s rentgenovými strukturami, které rovněž potvrzují, že tvar molekuly kalix[4]arenu není symetrický dle čtyřčetné rotační osy C₄, nýbrž zploštělý s výraznou π-interakcí protějšších benzenových jader. První dvě vlny jsou následovány jednou dvanáctielektronovou vlnou, z čehož lze usoudit, že vzniklý tetraradikálový tetraanion obsahuje čtyři ekvivalentní navzájem nekomunikující nitroradikálové aniony. Získané experimentální výsledky byly korelovány s kvantově chemickými výpočty HOMO a LUMO orbitalů jednotlivých redoxních meziproduktů.

Autoři děkují doc. RNDr. Pavlu Vojtíškoví, CSc. (Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta) a prof. Ing. Pavlu Lhotákovi, CSc. (Vysoká škola chemicko-technologická v Praze) za poskytnutí

studovaných nitroderivátů kalix[4]arenů. Finanční podpora projektu KONTAKT č. M 00209 (Ministerstvo školství, mládeže a tělovýchovy) je rovněž vysoce oceněna.

3P24 SPEKTRO-ELEKTROCHEMICKÁ STUDIE FOX-7 V APROTICKÉM PROSTŘEDÍ

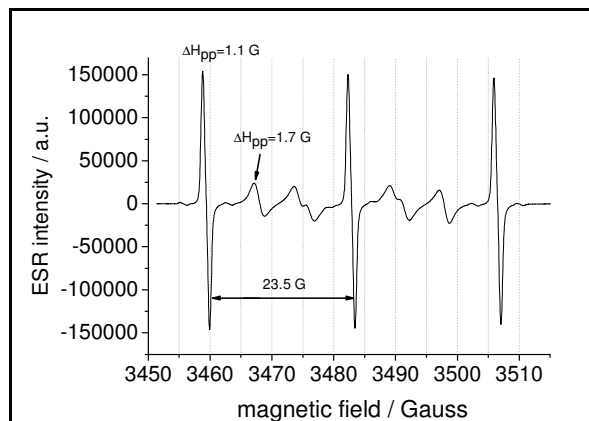
Ludmila Šimková¹, Jiří Ludvík¹, Jiří Klíma¹

¹Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v. v. i., Dolejškova 3, CZ-182 23, Praha 8,
ludmila.simkova@jh-inst.cas.cz

Nedávno syntetizovaná molekula 2,2-dinitroethen-1,1-diamin (FOX-7) [1] je jednou z velice zajímavých molekul s více redox centry. Jedná se o energetický materiál se značným potenciálem díky své nízké citlivosti a vysokému výkonu. Pozoruhodná je ale i její struktura a redox vlastnosti [2]. Kombinace dvou geminálních snadno se redukovatelných nitroskupin v sousedství dvou silně elektronodonorních aminů je typická pro případ tzv. push-pull delokalizace.

Výsledky elektrochemické redukce ve vodném pufrovaném prostředí ukázaly rozdíl mezi redukcí za polarografických (analytických) a elektrolytických (preparativních) podmínek [3]. Zatímco při polarografii dochází k heterogenní redukci na elektrodě v časové škále max. 2 sec. a spotřeba elektronů činí 18 elektronů, při preparativní elektrolýze je spotřeba elektronů na molekulu substrátu výrazně nižší (4 – 7 elektronů) v důsledku probíhajících pomalejších homogenních následných reakcí meziproductů.

Průběh elektrolýzy v aprotickém prostředí je doprovázen barevnými změnami. To ukazuje na přítomnost radikálových meziproductů. Pro sledování přítomnosti radikálů a barevných změn byla použita in situ UV/vis a EPR spektrometrie. Současně s elektrochemickými a zmíněnými spektroelektrochemickými metodami byla ke studiu FOX-7 využita i hmotnostní spektrometrie.



Obř. 1 EPR spektrum dvou různých radikálů pozorovaných v průběhu elektrolýzy FOX-7 v AN.

Dosavadní výsledky ukazují, že během preparativní elektrolýzy jak ve vodném tak i v aprotickém prostředí dochází k elektrochemicky iniciovanému rozkladu FOX-7 a nikoli k prosté redukci výchozí látky. Obsahem této práce je zachycení a identifikace meziproductů za účelem poznání tohoto komplikovaného mechanismu. Podle řady dosud poznanych průvodních jevů se tento degradační proces zdá být analogický s procesem exploze, je však zpomalen nízkou koncentrací látky a chlazen roztokem a tím roste naděje v jeho detailní prozkoumání.

Tato práce vznikla s podporou grantu KONTAKT (MŠMT) č. ME 09 002. Poděkování patří Prof. Františku Liškovi za uvedení do tohoto výzkumu a za cenné konzultace, a Ing. Zdeňku Jalovému z Ústavu energetických materiálů FCHT Univerzity Pardubice, který syntetizoval zkoumanou látku.

- [1] N.V. Latypov, J. Bergman, *Tetrahedron*, 54, (1998).
- [2] L. Šimková, F. Liška, J.Ludvík, *Current Org. Chem.* 2011, accepted.
- [3] L. Šimková, J. Klíma, P. Sazama, J.Ludvík: *J. Solid State Electrochem.* – submitted.

3P25 VZTAH STRUKTURA-VLASTNOSTI A NELINEÁRNĚ OPTICKÉ EFEKTY V DONOR 5,6-DISUBSTITUOVANÝCH PYRAZIN-2,3-DIKARBONITRILECH

Filip Bureš¹, Hana Čermáková¹, Jiří Kulhánek¹,
Miroslav Ludwig¹

¹Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice,
Studentská 573, 53210 Pardubice, filip.bures@upce.cz

Heterocyklické sloučeniny substituované vhodnými donory a akceptory jsou v poslední

době velice intenzivně studovány pro jejich snadnou polarizabilitu a z toho vyplývající vysokou optickou nelinearitu (NLO). Typický organický push-pull D- π -A chromofor sestává ze silných donorů D a akceptorů A spojených π -konjugovaným systémem heterocyklické sloučeniny a dalších π -konjugovaných podjednotek [1-2]. V nedávné době byly na našem pracovišti syntetizovány donor 5,6-disubstituované deriváty pyrazin-2,3-dicarbonitrilu jako chromofory vhodné pro NLO (Schéma 1, [3]). Syntéza těchto sloučenin zahrnuje jednak kondenzační reakce typické pro přípravu heterocyklických sloučenin, tak i moderní funkcionalizace cross-coupling reakcemi.

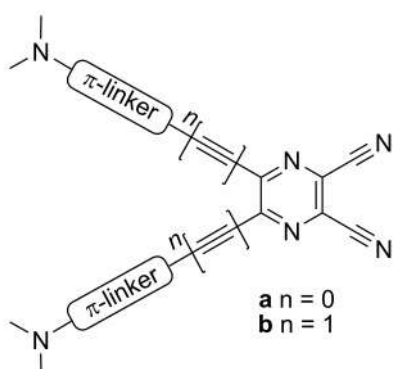


Schéma 1. D- π -A chromofory na bázi pyrazinu.

Lineární i nelineární vlastnosti těchto chromoforů byly dále studovány pomocí RTG analýzy, elektrochemie, absorpčních spekter, kvantově chemickými výpočty a měřením susceptibilit druhého druhu chromoforů zakomponovaných do fotopolymeru.

Tato práce byla podpořena Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy (MSM 002167501, LA09041).

- [1] Kulhánek J., Bureš F., Pytela O., Mikysek T., Ludvík J., Růžička A. *Dyes Pigm.* 2010, 85, 57-65.
 [2] Kulhánek J., Bureš F., Mikysek T., Ludvík J., Pytela O. *Dyes Pigm.* 2011, 90, 48-55.
 [3] Bureš F., Čermáková H., Kulhánek J., Ludwig M., Kuzník W., Kityk I. V., Mikysek T., Růžička A. *Chem. Eur. J.* 2011, zasláno.

3P26 NOVÝ SOFISTIKOVANÝ ZPŮSOB SYNTÉZY 1-PYRID-4-YL-PIPERAZINU A JEHO DERIVÁTU JAKO STAVEBNÍCH BLOKŮ PRO IMOBILIZOVANÉ KATALYTICKÉ SYSTÉMY

Barbora Andělová, Procházková Markéta,
Pazdera Pavel*

Centrum pro syntézy za udržitelných podmínek a jejich management, Ústav chemie, Masarykova univerzita, Kotlářská 2, 611 37 Brno, Barca.andel@seznam.cz; pazdera@chemi.muni.cz

1-Pyrid-4-yl-piperazin (PyPi) je zajímavou sloučeninou jednak proto, že je důležitým intermediátem pro syntézu léčiv působících proti srdeční arytmií. A dále zejména proto, že patří mezi 4-*N,N*-dialkylaminopyridiny podobně jako 4-*N,N*-dimethylaminopyridin (DMAP), který se používá jako katalyzátor pro inverzní katalýzu fázovým přenosem a hlavně jako aktivátor acylových reagentů.

Z literatury je známa příprava PyPi pětistupňovou syntézou z piperazinu. Celkový výtěžek syntézy je kolem 30 %¹. Vhodnějším způsobem by ale mohla být příprava PyPi z 4-chlor-1-(2-karbamoylethyl)pyridiniové soli (vzniká reakcí 4-chlorpyridinu s akrylamidem ve vodě) podle patentu². Výtěžek reakce je cca 60 %².

V příspěvku bude demonstrována nová přímá jednostupňová metoda přípravy PyPi a to katalyzovanou nukleofilní substitucí atomu chloru na 4-chlorpyridinu piperazinem. Doba reakce byla 12 h a výtěžek 80 %. Identifikace PyPi byla provedena NMR, FTIR, MS a struktura potvrzena X-ray strukturní analýzou. Dále byly u PyPi stanoveny hodnoty pK_{b1} a pK_{b2}.

Byly studovány alkylační reakce PyPi na nesubstituovaném dusíku piperazinu s methylakrylátem, akrylamidem, akrylonitrilem, dále acylace anhydridy dikarboxylových kyselin (ftal-, sukcin-, maleinanhydrid) a jeho reakce s nitromočovinou vedoucí k 1-karbamoyl-4-(pyrid-4-yl)piperazinu.

Nové 4-substituované 1-pyrid-4-yl-piperaziny budou využity jako stavební bloky pro syntézu farmaceutických meziproductů, imobilizovaných systémů pro inverzní katalýzu fázovým přenosem a aktivaci elektrofilních reagentů.

[1] Berkbreitr D. E.: *Organic Letters* 4 (5), 737-740 (2002).

[2] Nummy L. J.: *US Patent 4672121* (1987).

3P27

SYNTÉZY 1,1-DISUBSTITUOVANÝCH
PIPERAZIN-1-IOVÝCH SOLÍ

Dana Němečková, Barbora Andělová, Markéta Procházková a Pavel Pazdera

Centrum pro syntézy za udržitelných podmínek a jejich management, Ústav chemie, Masarykova univerzita, Kotlářská 2, 611 37, 80084@mail.muni.cz; pazdera@chemi.muni.cz

Piperazin je organická sloučenina tvořena šestičlenným kruhem obsahujícím dva atomy dusíku. Přípravuje se reakcí 1,2-dichlorethanu s alkoholovým roztokem amoniaku¹ nebo redukcí pyrazinu sodíkem². Piperazin a jeho deriváty jsou součástí mnoha významných léčiv³ (Sildenafil - lék na potenci, Clozapine - antipsychotikum, Imatinib - lék na leukémii), mají anthelmintické účinky a dále se používají při výrobě plastů, pesticidů, brzdových kapalin a dalších průmyslových materiálů.

Cílem práce bylo připravit kvarterní 1,1-disubstituované piperazin-1,4-diiové soli, které budou dále využity k syntéze nových imobilizovaných systémů pro „klasickou“ katalýzu fázovým přenosem. Kvarterní -oniové soli se s oblibou využívají jako katalyzátory pro klasickou PTC, kde se reagenty nachází ve dvou různých fázích a katalyzátory zajišťují přenos mezi těmito fázemi.

Byly připraveny a charakterizovány následující deriváty piperazinu: 1,1-dimethylpiperazin-1,4-diium dichlorid,

1-methyl-1-oktadecylpiperazin-1,4-diium dichlorid a 1-benzyl-1-methylpiperazin-1,4-diium dichlorid. Tyto kvarterní amoniové soli byly připraveny podle Schématu 1. Nově připravené kvarterní piperaziniové soli byly charakterizovány pomocí TLC, ¹H, ¹³C NMR spektroskopie, FTIR, metodou MALDI-TOF a byly stanoveny příslušné hodnoty pKa.

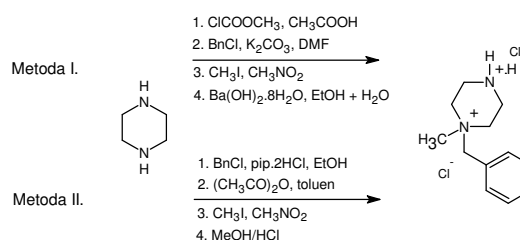


Schéma 1. Nové metody přípravy 1-benzyl-1-methylpiperazin-1,4-diium dichlorid

Práce byla podpořena z prostředků Ministerstva průmyslu a obchodu ČR, projekt č. 2A-ITP1/090.

- [1] Hofmann A. W.: Chem. Ber., (1890), 23, 3299.
 [2] Wolff.: Chem. Ber., (1893), 26, 724.
 [3] Vieth M., Siegel M. G., Higgs R. E., Watson I. A., Robertson D. H., Savin K. A., Durst G. L., Hipskind P. A.: J. Med. Chem., (2004), 47 (11), 224-232.

PREDNÁŠKY - SEKCIA 4: VYUČOVANIE A HISTÓRIA CHÉMIE

4P01

225 ANNIVERSARY OF THE 1ST INTERNATIONAL SCIENTIFIC CONGRESS – SLOVAKIA, SKLENÉ TEPLICE

Ivan Herčko, Dušan Velič, Marta Sališová and Viktor Milata

Slovak Chemical Society, Radlinského 9, 81237 Bratislava, salisova@fns.uniba.sk

The town Banská Štiavnica was a foremost center of innovation in mining industry. In 1627, gun powder was used here for the first time in the world in a mine. To drain water from the flooded mines, a sophisticated system of water reservoirs and channels, known as tajchy, was designed and

built by the local scientists Jozef Karol Hell, Maximilian Hell, and Samuel Mikovíny in the 18th century. Tajchy not only saved the mines from being closed, but also provided energy for the early industrialization. In 1735, the first mining school in the Kingdom of Hungary was founded there by Samuel Mikovíny.

In 1762 the Hofkammer in Vienna, with support from Queen Maria Theresa, transformed the school into the famous Mining Academy, creating the first technical university in the world. Department of chemistry and mineralogy was established as the very first department at the Academy and the first professor of chemistry was Nicolaus Jacquin from Leyden. Before he started teaching he asked for one year shift which he used for creation of new, modern chemistry laboratory and mineralogical collection. This laboratory became the most valuable part of the academy. Jacquin consequently joined theory with practice. Even the content of his lectures was original – based on his own laboratory

experiments. Also Lavoisier considered Jacquin as the founder of experimental chemistry. After Jacquin Anton Scopoli continued teaching of chemistry.

The greatest expansion of scientific research at Mining Academy was in years 1779 – 1792 when Anton Ruprecht (born in Smolník -Slovakia) became the the head of the Department. He continued in enlargement of the laboratory by new, modern equipment – so he and his students could realize the most exacting experiments.

The good rumour of the Mining Academy brought to Banská Štiavnica many well known scientists not only for a visit, but also for longer study states. One of them was I. Born, who organized in 1786 in Sklene Teplice the First International Scientific Congress. Invitation accepted among others John Hawkins from England, Lavoisier from Paris, brothers Henkels fro Norwegia, Charpentier and Wittig from Freiberg etc. At the meeting in 1786 also first International Sciety "La Société de l Exploration des Mines" was established.

The most prestigious credit had been given to the Mining Academy via the speech of French chemist Fourcroy in National Convent in 1794. He gave big price especially to the practical education in chemistry laboratory. He also suggested to established laboratory experiments at chemistry education in newly established school in 1794 – Parisien Polytechnique. By this way Mining Academy in Banská Štiavnica became the example for establishment of polytechnics in many European countries.

4P02

ČO BY MALI VEDCI VEDIEŤ O KOMUNIKÁCI S VEREJNOSŤOU?

Ján Reguli

Katedra chémie, Pedagogická fakulta Trnavskej univerzity, Priemyselná 4, 918 43 Trnava; jreguli@truni.sk

Zlý obraz chémie sa nedá prijímať ako fakt. Je potrebné podnikať všestranné kroky na jeho zlepšenie. Vedci vo svete si svoju povinnosť komunikovať s verejnosťou uvedomili už dávno. Preto univerzity, výskumné ústavy aj priemyselné spoločnosti pripravujú množstvo vzdelávacích materiálov a podujatí pre širokú verejnosť i pre školy[1]. Slovenskí chemici sa spolupráci s verejnosťou stále vyhýbajú, často ju chápu ako neefektívne zdržiavanie od vlastnej vedecko-výskumnej práce[2].

Komunikovanie výsledkov svojej práce širokej verejnosti vyžaduje uvedomiť si určité zásady a nadobudnúť komunikačné zručnosti. Preto mnohé inštitúcie, vrátane Európskej komisie pripravujú vzdelávacie materiály pre vedcov. Viaceré univerzity ponúkajú magisterské kurzy *Science Communication* alebo *Communicating Science*. V rámci riešenia nášho výskumného projektu sme pripravili seminár o komunikácii vedy pre doktorandov SAV[3].

Prvou zásadou je poznanie adresátov. Od nich sa potom odvíja forma komunikácie. V správe sa nemôžu vyskytovať príliš odborné pojmy alebo slengové vedecké výrazy. Ku komunikácii prostredníctvom novinárov by vedci nemali pristupovať s nedôverou. Novinári síce nemajú dostatočné prírodovedné znalosti, vedia však, aká má byť forma správy, ktorá dokáže verejnosť zaujať. Verejnosť skôr zaujme príbeh, než súbor informácií. Vedec predstavujúci výsledky svojej práce musí preukázať aj zanieťenie. Len tak bude schopný presvedčiť aj iných o jej prítlačivosti. (Ďalšie zásady sú predstavené v prednáške.)

Príspevok bol pripravený v rámci riešenia projektu MŠ SR VEGA 1/0413/10 „Princípy a stratégie komunikácie vedcov s verejnosťou“.

- [1] REGULI, J. Komunikácia vedcov s verejnosťou – história, súčasnosť a perspektívy. *Chemické Rozhľady* 11 (5), 259-266, (2010); ISSN 1335-8391.
- [2] REGULI J., BOGÁROVÁ, K. Vzťah slovenských chemikov ku komunikácii s verejnosťou. Aktuální aspekty pregraduální přípravy a postgraduálního vzdělávání učitelů chemie. Sborník přednášek z mezinárodní konference 29. září – 1. října 2010 v Trojanovicích. Ostrava : Ostravská univerzita, 2010, str. 228-233. ISBN 978-80-7368-426-6.
- [3] REGULI, J., KONEČNÁ, I. Ako dosiahnuť, aby si vedci s verejnosťou lepšie rozumeli? *Biologie, chemie, zeměpis* 20 (3x), 132-136 (2011). ISSN 1210-3349.

4P03

35 ROKOV TVORBY UČEBNÍČ CHÉMIE PRE ŽŠ U NÁS

Emil Adamkovič

Prosím venujme tichú spomienku spoluautorom týchto učebníc, ktorí už nie sú medzi nami:

*Doc. RNDr. Viktor Hofmann, CSc. (+ 1976)
Prof. RNDr. Otto Tomeček, PhD. (+ 2004)
Doc. Ing. Tibor Šramko, CSc (+ 2010)*

Pred 50 rokmi (1961) boli formulované úlohy vyučovania chémie v 8. a 9. ročníku ZDŠ v Československu tak, že už v roku 1967

konštatovali výsledky prieskumov, že vytýčené úlohy sa neplnia. Úsilie, poskytnúť kvantum konkrétnych chemických faktov o príprave a vlastnostiach konkrétnych látok a o ich využití spôsobilo predimenzovanosť učebného obsahu. Napriek tomu prebiehalo vyučovanie chémie takto ďalej.

Pred 35 rokmi (1976) začala rozsiahla obsahová a organizačná prestavba školstva u nás na základe dokumentu *Ďalší rozvoj čs. výchovno-vzdelávacej sústavy*. Ešte v tom istom roku boli v tíme pod vedením Doc. RNDr. V. Hofmanna z PF Brno vypracované a na VÚP Bratislava oponované experimentálne učebné osnovy chémie pre učiteľov a následne vypracované učebné texty pre žiakov. Učebné texty boli overované na 20 ZDŠ v SSR a na 150 ZDŠ v ČSR. V pedagogických časopisoch bolo k novej koncepcii a k výsledkom výskumu publikovaných viac ako 20 štúdií a článkov aj so stanoviskami čitateľov. Učebné texty boli posudzované priebežne viac ako 20 odborníkmi z oblasti chemických vied, didaktiky aj školskej praxe. Dlhodobo overovaný a následne v učebniciach chémie ZŠ 35 rokov uplatňovaný a spresňovaný didaktický model chémie, založený na všeobecnej chémii končí o rok.

V súčasnosti sa realizuje nový didaktický model chémie v 6. - 9. ročníku, ktorý rámcovo preberá obsah končiaceho didaktického systému, ale v inej štruktúre. Sledujme jeho realizáciu v učebniciach a v školskej praxi, nakoľko bude efektívny.

4P04 MOŽNOSTI A RIZIKA VYUŽÍVÁNÍ POČÍTAČOVÝCH ANIMACÍ A SIMULACÍ V POČÁTEČNÍ VÝUCE CHEMIE

Martin Bílek

*Oddělení didaktiky chemie, Katedra chemie,
Přírodovědecká fakulta, Univerzita Hradec Králové,
Česká republika; e-mail: martin.bilek@uhk.cz*

V prírodovedné výuce by měl být brán zřetel hlavně na to, aby využití počítače a dalších digitálních technologií nebylo samoučelné. Počítač by neměl být používán tzv. „sám pro sebe“, ale měl by sloužit jako didaktický prostředek k objasňování a prohlubování získávaných poznatků s důrazem na zvýšení efektivity dané vyučovací metody. Jednou z nejvýznamnějších oblastí počítačové podpory přírodovedné výuky je bezesporu počítačové modelování, a to jak statické (grafické modely)

tak dynamické (animace a simulace). Jeho úkol spočívá zejména v zpřístupňování jevů, v názornosti a vytvoření podmínek k získání poznatků z reálného experimentu [1]. Pro tvorbu didakticky účinných animací a simulací je důležitá následující posloupnost kroků: Realita → Konceptuální model → Didaktický model → Design model → Mentální model [2]. Současná situace ale přináší určité kontrasty v tom, že většina ve škole používaných animací a simulací postrádá akcentování didaktických kritérií. Jde o aplikaci zkrácené, nedostatečně propracované, cesty mezi „konceptuálním (vědeckým)“ a mentálním modelem učícího se. I z těchto důvodů jsou naše cíle směřovány k optimalizaci využívání animací a simulací ve výuce chemie již od základní školy, a to jako samostatných výukových objektů nebo v kombinaci s reálným školním chemickým experimentem [3].

Príspevek vznikl s podporou projektu Grantové agentury České republiky (GAČR) č. 406/09/0359.

- [1] Bílek, M. et al. Vybrané aspekty vizualizace učiva přírodovědných předmětů. Hradec Králové : Miloš Vognar M&V, 2007.
- [2] Frischherz, B., Schönborn, A. Animations and Simulations as Learning Objects. Modelling Process and Quality Criteria. 6. ICNEE – Proceedings, Neuchatel, 2004.
- [3] Bílek, M. et al.: Interaction of Real and Virtual Environment in Early Science Education: Tradition and Challenges. Hradec Králové : Gaudeamus, 2009.

4P05 VYUČOVANIE CHÉMIE V DIGITÁLNEJ ŠKOLE

Mgr. Katarína Javorová¹, Milica Križanová¹,
Beáta Brestenská¹

¹*Prírodovedecká fakulta UK, Mlynská dolina, 842 15,
javorovak@fns.uniba.sk, brestenska@fns.uniba.sk*

Digitálne technológie vstupujú a zasahujú do bežného života každého z nás, nevynímajúc učiteľov (všetkých typov škôl), žiakov a študentov. Implementácia digitálnych technológií do škôl, procesov vyučovania a učenia sa, do mimoškolských aktivít, ale aj do riadenia školy priamo súvisí s modernizáciou školského systému. Tento proces prebieha nielen na Slovensku (začal projektom Inforek Slovensko v roku 1999), ale aj vo väčšine európskych krajinách a ďalších krajinách sveta. Treba si uvedomiť, že vstupom digitálnych technológií do vzdelávacieho procesu učiteľ už nie je jediným zdrojom informácií. V príspevku sa zaoberáme

možnosťami využívania nových digitálnych technológií v práci učiteľa, digitálneho obahu, ako aj novými prístupmi vo vzdelávaní chémie na ZŠ a SŠ. Chceme poukázať, aká dôležitá je premena tradičného učiteľa na učiteľa 21. storočia (facilitátora, manažéra vzdelávania). Ak má byť učiteľ vzorom pre svojich žiakov v používaní moderných technológií, mal by ich mať k dispozícii a byť vzdelávaný v ich používaní vo svojom aprobačnom predmete. Z toho vyplýva aj neustála potreba celoživotného vzdelávania učiteľov.

- [1] Adamek, R. Baranovič R., Brestenská, B. a kol.: Moderná didaktická technika v práci učiteľa, Učebný materiál k modulu 2. elfa, s.r.o. Košice. Prvé vydanie. 2010. Košice. 200 s. ISBN 978-80-8086-135-3.
- [2] Javorová, K., Harvanová, L. a kol.: Využitie informačných a komunikačných technológií v predmete chémie pre základné školy, Učebný materiál – modul 3. elfa, s.r.o. Košice. Prvé vydanie. 2010. Košice. 283 s. ISBN 978-80-8086-157-5.
- [3] Lisá, V., Javorová, K: Chémia 6.-9.ročník ZŠ. Metodická príprava učiteľa pre moderné vzdelávanie s použitím Planéty vedomostí. Dr. Josef Raabe Slovensko, s.r.o., 2011. Bratislava. ISBN 978-80-89182-64-0.

4P06 CHÉMIA V KVÁDRI (POČÍTAČA)

PaedDr. Ivan Hnát

Gymnázium F.V.Sasinka, Námestie slobody 3, 90901 Skalica

Príspevok je zameraný na ukážky využitia počítača pri vyučovaní niektorého učiva, najmä však výpočtov z oblasti stredoškolskej chémie. Ukážky sú v programoch Excel a PowerPoint. Autor usiluje o vzbudenie záujmu rozumne a účelne využívať počítače vo vyučovaní chémie.

4P07 MÁ SMYSL UČIT PŘEDMĚT CHEMICKÁ INFORMATIKA?

Jaroslav Šilhánek

Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, Praha 6, 16628, silhanek@vscht.cz

V chemických oborech hrály informácie vždy významnou úlohu, o čomž svedčí dlhoročná história děl jako jsou kompendia Beilstein a Gmelin, nebo referátové časopisy Chemisches Zentralblatt a Chemical Abstracts. Bibliografie monografií popisující práci s těmito zdroji je již

od predválečného obdobia veľmi bohatá. Jiná otázka je systematická výuka študentů chémie v práci s chemickými informáciami, pochopiteľne do nedávnej doby výhradne tištnými. Tato nezbytná súčasť profesnej výchovy bola riešena buď predávaním zkušení staršieho kolegy, prípadne zavádzaním predmetů Chemická rešerše. Přechnod do elektronických forem otvoril nové aspekty a nové úkoly. Především potreby vübec seznámit študenty s elementárním princípy práce s výpočetní technikou v prostředí počítačových síti, chápaní pojmu báze dat, základní kroky zadávání dotazů a řadou dalších, zcela nových pracovních návyků. Postupem času, ale řada těchto kroků se od období devadesátých let stala běžnou rutinní záležitostí velké většiny vysokoškolských študentů a není dnes nutné seznamovat študenty jak pracovat s bázi dat. Na druhé straně ale značná část chemických informačních zdrojů v pravém slova smyslu je stále relativně náročný systém, který není v žádném případě zcela triviální. Otvírá se proto otázka, zda vübec, a když ano, tak v jakém rozsahu a v jakém zaměření tuto súčasť profesnej činnosti chemika učít.

4P08 PODPORA ODBORNÉHO VZDĚLÁVÁNÍ A ROZVOJE VĚDECKOVÝZKUMNÉHO TÝMU CENTRA MATERIÁLOVÉHO VÝZKUMU NA UNIVERZITĚ PARDUBICE

S. Valková¹, T. Wágner¹, L. Vítková², M. Vejchodová², M. Frumar¹

¹Univerzita Pardubice; Fakulta chemicko-technologická, Katedra obecné a anorganické chémie, Studentská 95, Pardubice, 53210, Česká Republika

²Univerzita Pardubice; Oddělení pro rozvoj a mezinárodní vztahy, Studentská 95, Pardubice, 53210, Česká Republika
silviedivalko@centrum.cz

Projekt „Podpora odborného vzdelávání a rozvoje vědeckovýzkumného týmu centra materiálového výzkumu na Univerzitě Pardubice“, také nazývaný Projekt „TEAM CMV“, byl zahájen 1.8.2009 v rámci Operačního programu Vzdelávání pro konkurenceschopnost.

Hlavním cílem projektu je realizovat ucelený program odborného vzdelávání mladých perspektivních pracovníků v oblasti vědy a výzkumu. Projekt je spolufinancován z Evropského sociálního fondu a státního rozpočtu ČR a je určený především študentům doktorských a magisterských oborů Univerzity Pardubice. Dalšími cílovými skupinami, na které

se daný projekt zaměřuje, jsou zkušení vědeckovýzkumní pracovníci, často vystupující v roli lektorů a zájemci o vědu a výzkum z řad veřejnosti.

Projekt reflektuje strukturu a zaměření Centra materiálového výzkumu vysokoškolského ústavu Univerzity Pardubice. Hlavním odvětvím vzdělávání je oblast materiálových věd s důrazem na nejnovější poznatky a praktické aplikace v oborech chemie a fyziky pevných látek, optiky, optoelektroniky, speciálních materiálů, nanomateriálů a nových zdrojů energie.

Projekt je tvořen šesti klíčovými aktivitami (KA): KA01 Teoretické a praktické vzdělávání českými odborníky, KA02 Přednášky a praktické tréninky vedené zahraničními odborníky, KA03 Zahraniční vzdělávací stáže, KA04 Aktivní účast na konferencích, KA05 Popularizace vědy a výzkumu, KA06 Hodnocení programu odborného

vzdělávání. Aktivit projektu probíhají již od 1.10.2009 v každoročním časovém období říjen-červenec.

V rámci tohoto projektu přednášeli v prostorách pardubické univerzity tuzemští i zahraniční odborníci jako prof. Kasap (Kanada), prof. Shimakawa a prof. Tanaka (Japonsko), prof. Gregory (Velká Británie), prof. Holý (Univerzita Karlova), doc. Celý (Masarykova Univerzita) a další.

Realizace projektu bude ukončena k 31. 7. 2011, avšak vysoce hodnocené přednášky a praktická cvičení budou organizovány i po ukončení projektu.

Autoři děkují Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy České Republiky MSM0021627501 a Výzkumnému Centru LC523 Univerzity Pardubice za jejich finanční podporu.

PREDNÁŠKY - SEKCIA 5 POTRAVINÁRSTVO, ŽIVOTNÉ PROSTREDIE A BIOTECHNOLÓGIA

5P01 LIPIDS IN HUMAN NUTRITION

Ján Šajbidor

*Faculty of Chemical and Food Technology STU,
Radlinského 9, 812 37 Bratislava,
jan.sajbidor@stuba.sk*

Lipids are the integral part of living organisms. It can be found in membrane structures (especially phospholipids and sterols), vacuoles (storage lipids – triacylglycerols or sterol esters) or on the cell surface (in association with polysaccharides and proteins) [1]. Partially oxidised lipids play very important role in regulation processes in tissues (hydroxyeicosanoids or prostaglandins). Lipids are essential part of human nutrition and main donor of energy for metabolism. Recent investigations confirmed the relation between dysfunction in polyunsaturated fatty acid metabolism and some human diseases (cancer, skin diseases, osteoporosis etc.) [2]. This article is focused on importance of polyunsaturated fatty acid in human nutrition.

[1] Šajbidor, J.: *Crit. Rev. Biotechnol.* 17 (2), p. 87-103, 1997

[2] Schley, P. D., Brindley, D. N., Field, C. J.: *J. Nutrition*, 137 (3), p. 548-553, 2007

5P02 RHIZOPUS ORYZAE – A NOVEL SOURCE OF FISH FEED AND THEIR LIPID PROFILE

Lucia Zahradnikova¹, Torbjörn Lundh¹, Anders Kiessling¹, Lars Edebo², Jana Pickova¹

¹*Swedish University of Agricultural Sciences, Uppsala, Sweden;* ²*University of Gothenburg, Gothenburg, Sweden*

Many studies have shown positive effects of the long chain polyunsaturated fatty acids (n-3 PUFA) in infant development, lowering risk of cancer and cardiovascular diseases, and having other potential health benefits. These health promoting effects have led to increased demand for fish.

The aquaculture industry has become the fastest growing food production sector worldwide and the requirement for fish meal and fish oil as an essential part of the diet of aquacultural species is increasing. For the sustainable aquaculture, alternative lipid sources in fish feed are needed. Emphasis is placed on sources rich in long chain n-3 PUFA in order to meet positive effect on fish health and nutritional value of the product. Some pilot studies have been performed using a fungus species *Rhizopus oryzae* as a part of fish diet and results have been presented by Bankefors *et al* (2011).

In our study, mycelium biomass of *Rhizopus oryzae* was analyzed for lipid content and fatty

acid profile. Mycelium was extracted with hexane – isopropanol (3:2, v/v) according to Hara and Radin (1978). To determine different lipid classes, samples were separated using high performance thin layer chromatography and the ratio of lipid classes was measured densitometrically. To determine fatty acid composition, fatty acid methyl esters were prepared (Appelqvist, 1968) and analyzed by gas chromatography. Depending on the cultivation conditions the lipid content of the zygomycetes varied between 8 and 19%. The main fatty acids identified in the samples were oleic acid, palmitic acid and stearic acid. The unsaturated 18 carbon fatty acids amounted to 47-62% of the fatty acids. Oleic acid was always dominating being 32-43% of all fatty acids.

- [1] Appelqvist, L. (1968). Rapid methods of lipid extraction and fatty acid methyl preparation for seed and leaf tissue with special remarks on preventing the accumulation of lipid contaminants. *Ark. Kemi*, **28** (36), 551-570.
- [2] Bankefors, J., Kaszowska, M., Schlechtriem, C., Pickova, J., Brännäs, E., Edebo, L., Kiessling, A., Sandström, C.A. (2011). A comparison of the metabolic profile on intact tissue and extracts of muscle and liver of juvenile Atlantic salmon (*Salmo salar* L.). *Food Chemistry*, accepted manuscript.
- [3] Hara, A., Radin, N.S.(1978). Lipid extraction of tissues with low - toxicity solvent. *Analytical Biochemistry*, **90**, 420-426.

5P03 TERMOSTABILITA CIS IZOMERŮ LUTEINU

Barbora Hrvolová¹, Jiří Kalina¹

¹Ostravská univerzita v Ostravě, Dvořákova 7, 701 03, Ostrava, B.Hrvolova@seznam.cz

Lutein patří ke karotenoidům, významným pigmentům mnoha biologických systémů, v nichž plní různorodé funkce. Můžeme jej nalézt jak v tkáních živočišných tak i rostlinných. Předmětem mnoha studií se stal díky svým antioxidačním schopnostem, především pro svůj preventivní účinek proti stařeckému degenerativnímu onemocnění makuly (AMD) [1]. Karotenoidy, tedy i lutein, mohou díky své struktuře vytvářet geometrické izomery, tzv. stereoizomery, *cis* a *trans*. Jelikož se tyto konfigurace liší svou strukturou lze u nich předpokládat i rozdílné fyzikálně-chemické vlastnosti [2]. Dlouhou dobu se předpokládalo, že se v biologických systémech velmi reaktivní *cis* izomery přirozeně vůbec nevyskytují. Toto

tvrzení však bylo vyvráceno jejich izolací [3]. *Cis* izomery představují, díky svým vlastnostem, možnost vyššího antioxidačního účinku. *All-trans* forma je obecně považována za stabilnější než *cis*-forma. Pro možné využití potencionálně vyšších antioxidačních vlastností *cis* izomerů jsme se zabývali jejich termostabilitou. U *cis* izomerů jsme ověřili jejich termostabilitu při 6, 36 a 40 °C. *Cis* izomery byly za těchto podmínek shledány jako stabilní.

Příspěvek byl vypracován v rámci projektu Institut environmentálních technologií, reg. č. CZ.1.05/2.1.00/03.0100 podporovaného Operačním programem Výzkum a vývoj pro Inovace, financovaného ze strukturálních fondů EU a ze státního rozpočtu ČR.

- [1] ZHAO L., SWEET B. V.: Lutein and zeaxanthin for macular degeneration, *Am J Health Syst Pharm*, **65**, 13, (2008) 1232-1238
- [2] SHIEBER A., CARLE R.: Occurrence of carotenoid *cis*-isomers in food: Technological, analytical, and nutritional implications, *Trends in Food Science & Technology*, **16**, (2005) 416–422
- [3] STAHL W., SUNDQUIST A. R., HANUSH M., SCHWARTZ W., SIES H.: Separation of beta-carotene and lycopene geometrical isomers in biological samples, *Clin. Chem.*, **39**, (1993) 810–814

5P04 FERMENTACE SÓJI BAKTERIEMI MLÉČNÉHO KVAŠENÍ

Lenka Knorová¹, Šárka Horáčková¹, Eva Dvořáková¹, Ivana Sosnovcová², Věra Schulzová², Milada Plocková¹

¹Ústav technologie mléka a tuků¹, Ústav chemie a analýzy potravin² – Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika milada.plockova@vscht.cz

Fermentované sójové nápoje představují zajímavou alternativu k fermentovaným mléčným nápojům. Fermentace sójového nápoje a kravského mléka bakteriemi mléčného kvašení (BMK) má však odlišný průběh související s rozdíly v metabolismu BMK v mléce a v sójovém nápoji vedoucí k rozdílnému vzniku biologicky aktivních látek při fermentaci obou substrátů [1,2].

S použitím kombinace jogurtové kultury a různých kmenů bifidobakterií byl připraven fermentovaný sójový analog jogurtu s přijatelnými senzoryckými parametry. Tento produkt byl zhodnocen z hlediska počtu jednotlivých druhů přítomných BMK, L(+) a D(-)

isomeru kyseliny mléčné, kyseliny octové, úbytku jednotlivých typů sacharidů přítomných v sójovém nápoji a obsahu biologicky aktivních aglykonů isoflavonů. Tyto vznikaly především v produktech fermentovaných směsí jogurtové kultury YC-381 a kmenem *Bifidobacterium bifidum* CCDM94 (6,33mg/100ml). Nejvíce byl zastoupen genistein (4,02 mg/100ml), a daidzein (2,23 mg/100ml).

Práce byla podpořena grantem Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy 6046137305.

[1] Champagne C.P., Green-Johnson J., Raymond Y., Barrette J., Buckley N.: Food Research International 42, 612-621 (2009).

[2] Pham T.T., Shah N.P.: Journal of Food Science 72, 316-324 (2007).

5P05

VÝVOJ HPLC-DAD METODY STANOVENÍ VYBRANÝCH FENOLICKÝCH LÁTEK A JEJÍ APLIKACE PŘI STUDIU VLIVU RŮZNÝCH RADIAČNÍCH PODMÍNEK NA JEJICH AKUMULACI V LISTECH JEČMENE JARNÍHO

Jakub Nezval¹, Jiří Kalina²

¹Katedra fyziky, Přírodovědecká fakulta Ostravské univerzity v Ostravě, 30.dubna 22, 703 01 Ostrava, Nezval.jakub@gmail.com

²Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta Ostravské univerzity v Ostravě, 30.dubna 22, 703 01 Ostrava, Jiri.kalina@osu.cz

Fenolické látky (FL) se řadí mezi produkty sekundárního metabolismu vyšších rostlin, hrají významnou roli v jejich ochraně vůči působení abiotických i biotických stresových faktorů a slouží též jako signální molekuly. FL jsou intenzívně zkoumány i v souvislosti s jejich zdraví prospěšnými účinky (prevence kardiovaskulárních a onkologických onemocnění)

V rámci této práce byla vytvořena nová HPLC-DAD metodika umožňující identifikaci a kvantifikaci 24 vybraných FL náležejících do skupin fenolických kyselin, flavonoidů, stilbenů a jejich derivátů. Mezi hlavní výhody této metodiky patří především její malá časová náročnost - 16 minut, navíc lze tuto metodu provést na přístrojích schopných pracovat při zpětném tlaku do 400 Bar. Na základě analýzy standardů výše zmíněných látek a jejich směsí byla vytvořena databáze absorpčních spekter, jejich derivací, retenčních časů a kalibračních rovnic. Absorpční spektra a kalibrační rovnice

byly též získány pomocí UV-VIS absorpčního spektrofotometru.

Tato metoda byla následně modifikována a aplikována při analýze volných fenolických látek obsažených v listových extraktech ječmene jarního pěstovaného za různých radiačních podmínek tj. různé úrovni fotosynteticky aktivní a UV-A radiace. Na základě získaných dat byl pozorován vliv jednotlivých složek radiace na syntézu a akumulaci těchto látek.

Příspěvek byl vypracován v rámci projektu Institut environmentálních technologií, reg. č. CZ.1.05/2.1.00/03.0100 podporovaného Operačním programem Výzkum a vývoj pro Inovace, financovaného ze strukturálních fondů EU a ze státního rozpočtu ČR a za přispění SGS 16/PřF/2011.

5P06

TERMICKÉ VYUŽITÍ BIOMASY PROCESEM PARCIÁLNÍ OXIDACE

Michael Pohořelý^{1,2}, Michal Jeremiáš^{1,2}, Petra Kameníková¹, Karel Svoboda¹, Sjarhei Skoblia³, Michal Šyc¹, Miroslav Punčochář¹

¹Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i., Rozvojová 135, 165 02 Praha 6

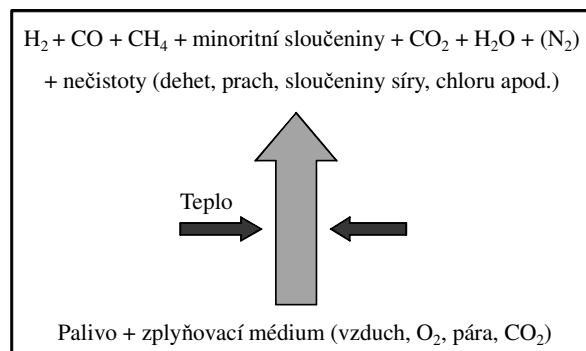
²Ústav energetiky, VŠCHT v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6

³Ústav plynárenství, koksochemie a ochrany ovzduší, VŠCHT v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6

Kontakt: email: pohorely@icpf.cas.cz, pohorelm@vscht.cz, tel.: 220390261

Termické zplyňování (Obr. 1) je perspektivní technologií pro přeměnu cíleně pěstované či odpadní ligno-celulózoové biomasy na výhřevný plyn, který je vhodný pro kogenerační výrobu elektrické energie a tepla a v budoucnu i pro výrobu transportních paliv či jiných žádoucích komodit [1, 2].

Přednáška se zabývá problematikou možnosti využití plynu ze zplynění biomasy. V přednášce jsou vysvětleny fyzikálně-chemické základy procesu zplyňování, popsány a charakterizovány jednotlivé typy využívaných generátorů a naznačeny možnosti čištění plynu pro jednotlivé potenciální aplikace. V druhé části přehledné přednášky jsou vysvětleny možnosti transformace generátorového plynu na elektrickou energii a teplo i jednotlivá alternativní či stávající transportní paliva včetně nároků na složení a čistotu plynu.



Obr. 1 Schéma zplyňování

Tato práce vznikla díky finanční podpoře Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy, na základě projektů: WARMES č. 2B08048, MSM č. 6046137304 a č. 21/2011 (specifický vysokoškolský výzkum) a projektu Technologické agentury České republiky BROZEN č. TA01020366.

- [1] Pohořelý M., Jeremiáš M., Kameníková P., Svoboda K., Skoblia S., Tošnarová M., Šyc M., Punčochář M.: Možnosti uplatnění plynu ze zplyňování biomasy, 8. mezinárodní konference Chemie energetických cyklů CHEO 8, Sborník přednášek, pp. 1-6, Praha, Česká republika, 07-08 září 2010.
- [2] Pohořelý M., Jeremiáš M., Kameníková P., Skoblia S., Svoboda K., Punčochář M.: Zplyňování biomasy. Chem. Listy, v tisku.

5P07

VYUŽITÍ ODPADNÍCH BIOMATERIÁLŮ K SORPCI TOXICKÝCH OXOANIONTŮ ARSENU, SELENU A ANTIMONU Z KONTAMINOVANÝCH VOD

Barbora Doušová¹, Bohumila Jakubíková¹, Ivo Šafařík², Stanislava Krejčová¹, David Koloušek¹, Miloslav Lhotka¹, Vladimír Machovič¹

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

²Ústav systémové biologie a ekologie AVČR, v.v.i., Na Sádkách 7, 370 05 České Budějovice, ČR

Oxoanionty arsenu, selenu, antimonu a dalších patří k vysoce toxickým kontaminantům, proto se světový výzkum zabývá nejen jejich charakterizací ve složkách prostředí, ale také možnostmi efektivní dekontaminace zatížených oblastí. V přirozeném prostředí se oxoanionty uvedených prvků selektivně sorbují na hydratované oxidy hydroxidy Fe (HFO), případně Al a Mn, se kterými vytvářejí stabilní povrchové komplexy [1,2]. Komerčně vyráběné sorbenty na bázi HFO jsou velice efektivní, ale drahé, a tedy nevhodné pro silně znečištěné nebo průběžně kontaminované systémy. Proto jsou vyhledávány

nové sorbenty mezi druhořadými, a tedy levnými materiály. Perspektivními, i když netradičními sorbenty se stávají odpadní biologické materiály, v původní nebo modifikované formě. Byly testovány například kvasinky (KV) nebo smrkové piliny (P). Jako nejefektivnější se jevila povrchová modifikace ionty Fe, ke kterým jsou anionické kontaminanty přirozeně afinitní [2,3]. V následující tabulce jsou shrnuty některé účinnosti adsorpce arseničnanů a seleničnanů na vybrané biosorbenty.

Tab. 1 Adsorpce AsO_4^{3-} a SeO_3^{2-} na odpadní kvasinky a piliny

sorbent	účinnost (%)	
	AsO_4^{3-}	SeO_3^{2-}
KV	4.7-21.8	34-40.5
KV-Fe ²⁺	82-95	96-97
P	7-8.5	11.5-13
P-magn.	83-95	
Fe		68-89

Účinnost adsorpce závisí nejen na způsobu modifikace sorbentu, ale také na koncentraci sorbovaného iontu a pH systému.

Práce byly podporovány projekty GAČR P210/10/0938 a výzkumným záměrem MŠMT ČR č. 6046137302.

- [1] Sherman, D.M. and 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. et Cosmochim. Acta* 67, 2003.
- [2] Doušová, B., Grygar, T., Martaus, A., Fuitová, L., Koloušek, D., Machovič, V. (2006): Sorption of AsV on aluminosilicates treated with FeII nanoparticles. *J. Coll. Interface Sci.* 302, 424-431.
- [3] Doušová, B., Fuitová, L., Grygar, T., Machovič, V., Koloušek, D., Herzogová, L., Lhotka, M. (2009): Modified aluminosilicates as low-cost sorbents of As(III) from anoxic groundwater. *J. Hazardous Mater.* 165, 134-140.

5P08**AKTINOLIT – AZBESTOVÝ MINERÁL V ŽIVOTNÍM PROSTŘEDÍ NA PLZEŇSKU A JEHO DETEKCE PRÁŠKOVOU RENTGENOVOU DIFRAKČÍ**David Havlíček¹, Miroslav Klán², Jiří Plocek³¹Katedra anorganické chemie PŘ.F. UK, Albertov 6, 128 43 Praha 2²Odbor životního prostředí, Magistrát města Plzně³Ústav anorganické chemie AV ČR, v.v.i., Řež u Prahy

Aktinolit patří do skupiny amfibolových azbestových minerálů. Tyto minerály jsou jehlicovité a tvoří respirabilní vlákna, jejichž karcinogenní působení bylo již dříve spolehlivě prokázáno. Otázka nebezpečnosti štěpných fragmentů aktinolitu uvolňovaných z horniny však není ještě zcela objasněna. Nicméně měření azbestových vláken na plzeňsku opakovaně potvrdilo významný výskyt respirabilních vláken aktinolitu ve venkovním ovzduší. Zdrojem tohoto znečištění jsou proterozoické metabazaly (tradičně nazývané „spility“), složené z plagioklasu (oligoklasu až albitu), chloritu a aktinolitu, v menší míře je přítomen i augit, kalcit, zoisit a titanit. V předkládané práci jsme studovali práškovou rentgenovou difrakcí obsah aktinolitu v různých polohách aktivního kamenolomu Litice (PŘ.F.UK, difraktometr X'PERT PRO MPD, PANalytical) a identifikovali jeho vláknitou (respirabilní) povahu (ÚACH, elektronový mikroskop Jeol JSM-6510). Zároveň jsme však práškovou rentgenovou difrakcí analyzovali polétavý prach PM₁₀ v Plzni zachycený na skleněných filtrech „beta-prachoměřů“ na třech stanicích automatického imisního monitoringu města Plzně (Skvrňany, Plzeň střed a Chlum) v závislosti na meteorologické situaci. Identifikace aktinolitu na těchto filtrech (ve venkovním ovzduší obydlené oblasti) může být jedním z důvodů nápadně zvýšeného výskytu karcinomu na Plzeňsku. Míra škodlivosti štěpných fragmentů aktinolitu obsaženého v hornině na lidské zdraví není ovšem ještě dostatečně objasněna.

5P09**SLEDOVANIE ZÁVISLOSTI BIOCHEMICKÝCH UKAZOVATEĽOV OD KONCENTRÁCIE OZÓNU**

Marián Schwarz, Vladimír Lalík

Fakulta ekológie a environmentalistiky, Technická univerzita vo Zvolene, T. G. Masaryka 24, 960 53 Zvolen, schwarz@vsl.d.tuzvo.sk

U obyvateľstva Žiarskej kotliny boli v rámci monitorovacieho systému o záťaži obyvateľstva faktormi prostredia sledované prevalečné charakteristiky výskytu kardiovaskulárnych ochorení, ako sú hodnoty lipoproteínov: celkový cholesterol (CCHL), HDL cholesterol (HDL), LDL cholesterolu (LDL) a triacylglycerolov (TG), ktoré boli stanovené v kapilárnej krvi 79 vyšetrených osôb na prístroji Reflotron. Vyšetrovaný súbor pochádzal z piatich obcí Žiarskej kotliny rovnomerne rozdelený podľa pohlavia a veku na základe demografického zloženia obyvateľstva.

Na základe známych interakcií ozónu s biologicky aktívnymi molekulami [1] boli v našej práci sledované závislosti 24-hodinových priemerných koncentrácií ozónu v uvedenej oblasti [2] od vyššie uvedených biochemických ukazovateľov, ktoré boli vyšetrené nasledujúci deň. V prípade CCHL, LDL a TG bola zistená záporná korelácia a v prípade HDL bola zistená záporná korelácia u žien a kladná korelácia u mužov. Okrem uvedeného boli korelované aj rizikové indexy I_a (index aterosklerózy LDL/HDL), r₁ (pomer CCHL/HDL) a r₂ (pomer TG/HDL), pri ktorých vo všetkých prípadoch bola zistená záporná korelácia.

Aj keď štatistická významnosť sledovaných závislostí bola všeobecne veľmi nízka (hodnoty koeficientu determinácie R² sa pohybovali v intervale 0,0004 – 0,098), v práci sú diskutované trendy a vzájomné súvislosti pri vysvetľovaní kauzálnych vzťahov, pretože aj keď je toxicita prízemného ozónu vysoká, jeho prítomnosť môže zohrávať určitý vplyv aj pri výskyte kardiovaskulárnych ochorení spôsobených vyššími hladinami nebezpečných lipoproteínov.

Táto publikácia vznikla vďaka podpore v rámci operačného programu Výskum a vývoj pre projekt: Centrum excelentnosti pre bielo-zelenú biotechnológiu, ITMS 26220120054, spolufinancovaný zo zdrojov Európskeho fondu regionálneho rozvoja a vďaka Grantovej agentúre KEGA za finančnú podporu pri riešení projektov č. 011TU Z-4/2011 a 007TU Z-4/2011.

- [1] Stewart, C., Wilson, L., Zhang, Q., Pham, C. L., Waddington, L., Staples, M., Stapleton, D., et al. (2007). Oxidized cholesterol metabolites found in human atherosclerotic lesions promote apolipoprotein C-II amyloid fibril formation. *Biochemistry*, 46(18), 5552-5561.
- [2] Schwarz, M. (2008). Problematika profesionálnych a environmentálnych expozícií ozónu. *Technická univerzita, Zvolen*, 90 s. ISBN978-80228-1944-2.

5P10 MAGNETICALLY RESPONSIVE BIOCOMPOSITES FOR ENVIRONMENTAL TECHNOLOGY AND BIOTECHNOLOGY

Ivo Safarik¹, Katerina Horska¹, Kristyna Pospiskova², Mirka Safarikova¹

¹*Department of Nanobiotechnology, Institute of Nanobiology and Structural Biology of GCRC AS CR, Na Sadkach 7, 370 05 Ceske Budejovice, Czech Republic, ivosaf@yahoo.com*

²*Department of Biochemistry, Faculty of Science, Palacky University, Slechtitelu 11, 783 71 Olomouc, Czech Republic*

Magnetic nano- and microparticles have already found many important applications in various areas of biosciences, medicine, biotechnology, environmental technology etc. In most cases they can be described as composite materials, where the magnetic properties are caused by the presence of iron oxides nano- or microparticles. Such materials can be efficiently separated from difficult-to-handle samples and targeted to the desired place, applied as contrast agents for magnetic resonance imaging or used to generate heat during exposure to alternating magnetic field.

A large amount of magnetic biocomposites has been developed recently. In many cases magnetic fluids or magnetic nanoparticles can be used to convert diamagnetic biological materials (e.g., microbial and algae cells, plant-derived materials, cellulose, chitosan, plant gums etc.) into their magnetic derivatives. Magnetic biocomposites have been successfully used as adsorbents for the removal of both organic and inorganic xenobiotics, such as dyes, pesticides, heavy metal ions and radionuclides, and for immobilization of biologically active compounds (e.g., enzymes) and affinity ligands. Magnetically modified living microbial cells can serve as whole cell biocatalysts. Magnetic modification of biological materials enables to prepare stimuli responsive

materials with a great potential for future applications.

- [3] Safarik, I., Safarikova, M.: Magnetic nano- and microparticles in biotechnology. *Chem. Papers* 63 (2009) 497-505
- [1] Safarik, I., Safarikova, M.: Magnetically responsive nanocomposite materials for bioapplications. *Solid State Phenomena* 151 (2009) 88-94
- [2] Safarik, I., Safarikova, M.: Magnetically responsive (nano)composites as perspective materials for environmental technology applications. *ENT Magazine (January - February)* (2010) 85-90

5P11 METHODS FOR EDIBLE FATS AND OILS SHELF LIFE DETERMINATION AND PREDICTION

Štefan Schmidt¹, Lenka Vrbiková¹, František Kreps¹, Jarmila Hlásniková¹, Ivana Kolesárová¹, Stanislav Sekretár¹, Július Annus²

Faculty of chemical and food technology (FCHPT) – STU Bratislava, ¹Institute of Biotechnology and Food Science, ²Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, stefan.schmidt@stuba.sk

Oxidative reactions that involve lipids are among the most important causes of deterioration of microbiologically stable foods and affect both their shelf life and their organoleptic and nutritional properties [1]. The shelf life of a food can be defined as the time period within which the food is safe to consume and has an acceptable quality to consumers. More precisely, shelf life is defined as the time, under defined storage conditions, during which food remains safe, retains desired sensory, chemical, physical and biological characteristics as well as complies with any label declaration. Just like any other food, fat products deteriorate during storage by different modes or mechanisms.

The evaluation or prediction of shelf life is very important to verify how long the product will last before it oxidized to a level that makes the product unsuitable for consumption [2, 3]. Shelf life assessment strategies of fats and oils suffering oxidation will be discussed, focusing on definition of the acceptability limit, described by proper oxidative indicators, and methodologies for shelf life testing. In this regard, methods of shelf life evaluation under actual storage conditions and methods of shelf life prediction based on exploitation of proper accelerating environmental factors will be illustrated.

This project was supported by the Scientific Grant Agency (VEGA) of the Ministry of Education of the Slovak Republic and the Slovak Academy of Sciences (Grant No. 1/0746/08).

- [1] Štefan Schmidt, Lenka Vrbíková, Jarmila Hlásniková, Ivana Kolesárová, František Kreps, Stanislav Sekretár: Metódy sledovania oxidačnej stability tukov a olejov. In: Zborník prednášok z 49. Mezinárodnej konferencie o olejoch a tukoch. Staré Splavy, 4. – 6. 5. 2011, in press.
- [2] Reza Farhoosh: Shelf-life prediction of edible fats and oils using Rancimat. *Lipid Technol.* 19, 2007, p. 232-234.
- [3] Sonia Calligaris, Lara Manzocco, Maria Cristina Nicoli: Application of a modified Arrhenius equation for the evaluation of oxidation rate of sunflower oil at subzero temperatures. *J. Food Sci.* 69, 2004, p. E361-E366.

5P12

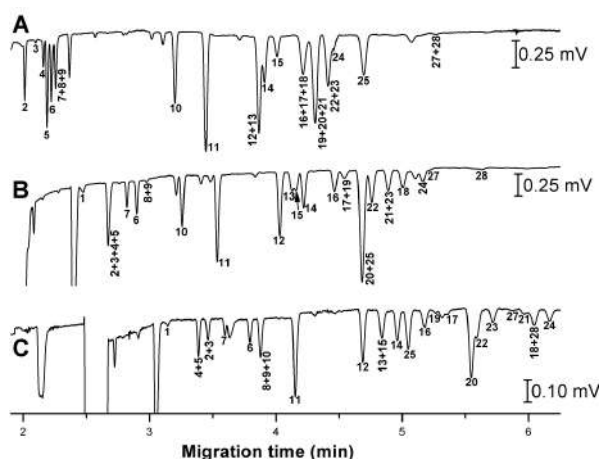
ELEKTROFORETICKÉ MONITOROVÁNÍ AMINOKYSELIN PRO KLINICKÉ ÚČELY

Petr Tůma¹, Eva Samcová¹, Vlastimil Jurka²

¹Ústav biochemie, molekulární a buněčné biologie, 3. lékařská fakulta Univerzity Karlovy v Praze, Ruská 87, 100 00 Praha 10, petr.tuma@lf3.cuni.cz²

²Oddělení spintroniky a nanoelektroniky, Fyzikální ústav AV ČR, v.v.i., Cukrovarnická 10/112, 162 00 Praha 6

Moderní klinické studie jsou založeny na současném stanovení širokého počtu analytů na velkých souborech vzorků v krátkém časovém rozmezí. Tyto požadavky je možno splnit při využití kapilární elektroforézy, která se vyznačuje krátkou dobou separace, snadnou laboratorní úpravou biologického materiálu a vysokou separační účinností [1]. Stanovení spektra 30 nejvýznamnějších aminokyselin a jim příbuzných látek bylo provedeno pomocí kapilární elektroforézy během několika minut. Pro detekci neabsorbujících aminokyselin byla použita bezkontaktní vodivostní detekce, která je univerzální detekční technikou vhodnou zejména pro detekci neabsorbujících analytů [2]. Pomocí kombinace vysokoúčinné elektroforetické separace na krátké dráze a bezkontaktní vodivostní detekce bylo dosaženo limitů detekce na submikromolární úrovni. Úprava biologického materiálu je založena pouze na deproteinizaci tělní tekutiny přidávkem acetonitrilu a následné filtraci. Vyvinutá metodika je vysoce univerzální a byla testována při analýze krevní plasmy, moče, plodové vody, mozkomíšního moku, slin a mikrodialyzátů tkání [3].



Obř. 1 Elektroferogram krevní plasmy po deproteinizaci acetonitrem. Experimentální podmínky: separační elektrolyt, kyselina octová, 0,5 mol/L (A), 4 mol/L (B) and 8 mol/L (C); křemenná kapilára, id 25 μ m, celková délka, 33 cm, délka k detektoru, 18 cm; hydrodynamické dávkování tlakem 50 mbar po dobu 16 s; separační napětí, +20 kV. Identifikace píků: 1 cholin, 2 kreatinin, 3 β -Ala, 4 ornithin, 5 Lys, 6 His, 7 Arg, 8 1-methylhistidin, 9 3-methylhistidin, 10 Gly, 11 Ala, 12 Val, 13 Ile, 14 Leu, 15 Ser, 16 Thr, 17 Asn, 18 Trp, 19 Met, 20 Gln, 21 citrullin, 22 Glu, 23 Phe, 24 Tyr, 25 Pro, 26 CysCys, 27 Asp, 28 4-hydroxyprolin.

Autoři děkují grantovým agenturám za poskytnuté finanční prostředky, Grantová agentura České Republiky, grant č. P206/10/I231 a Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy, výzkumný záměr č. MSM0021620814.

- [1] P. Tůma, E. Samcová: *Chem. Listy* 101 (2007) 200-207.
- [2] P. Tůma, E. Samcová, K. Andělová: *J. Chromatogr. B* 839 (2006) 12-18.
- [3] P. Tůma, K. Málková, E. Samcová, K. Štulík: *J. Sep. Sci.* 33 (2010) 2394-2401.

5P13

FALSE-POSITIVE AND FALSE-NEGATIVE BLOODSTAIN DETECTION

Martina Bancířová¹, Eva Ratajová¹

¹ Department of Physical Chemistry, Faculty of Science, Palacký University, 17. listopadu 12, 77146 Olomouc, Czech Republic martina.bancirova@upol.cz

The latent bloodstains (blood dilution more than 1:1000) are detectable by using of Fluoroskan Ascent FL. In case of the blood dilution more than 1:1000, the stain is colourless. Three common known methods (detection according to Grodsky, Weber and by Bluestar® Forensic latent bloodstain reagent) are based on the luminol

chemiluminescence. The bloodstains can be covered up by drinks and foods or can be cleaned by some cleaning agents. The aim of this work was to compare the ability of the cleaning agents containing chlorine to cause false-positive results and the ability of the black and green tea to cause false-negative results during the chemiluminescent bloodstain detection. The samples of the black and green tea were able to decrease or minimize the chemiluminescent light emission during the bloodstain detection by using of all detection mixtures (according to Grodsky, Weber and by Bluestar® Forensic latent bloodstain reagent) during the first minute after the injection of them. The light intensity in the presence of chlorine was too high for the measurement by using of Fluoroskan Ascent FL.

Supported by grant MSM No. 6198959216

5P14 ANALYTICKÁ CHEMIE V FYZIOLOGII ROSTLIN

Jiří Kalina¹, Jakub Nezval¹, Barbora Hrvolová¹, Michala Zgarbová¹

¹Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta Ostravské univerzity v Ostravě, 30.dubna 22, 703 01 Ostrava, jiri.kalina@osu.cz

Aplikace analytických metod v ekofyziologii rostlin je důležitým, nezbytným krokem pro porovnání kontrolních a stresem ovlivněných rostlin jakožto nástrojem pro předpověď možných účinků. Ke stresům – stresorům můžeme přičítat i takové přírodní vlivy jako jsou zvýšená koncentrace CO₂, zvýšený příkon UV_B radiace, zvýšená fotosynteticky aktivní ozáření, teplo – teplota, či další. Vývoj metod pro kvantifikaci fotosynteticky aktivních látek je nezbytný pro celou škálu ekofyziologických studií.

Byla vyvinuta metoda pro stanovení projekční plochy listů, jakožto jeden z možných vztažných parametrů. Byly upraveny metodiky pro spektrofotometrické stanovení obsahu chlorofylů a karotenoidů i HPLC metodika pro kvalifikaci a kvantifikaci těchto pigmentů. Byla upravena a vyvinuta metodika pro kvantitativní stanovení aktivity a množství enzymu Rubisco – jakožto nejzastoupenějšího a málo účinného enzymu na naší planetě. Byla vyvinuta metodika selektivní extrakce zdravotně významných pigmentů (lutien, zeaxantin) z rostlinného materiálu (roslinným materiálem byla křídlatka.).

Získané poznatky dovolují separovat a kvantifikovat důležité látky, které by mohly být

využity i kosmetickém a farmaceutickém průmyslu, ale i získávat informace o stresově zatížených rostlinách vzhledem ke kontrolním a tak dát podklady do modelů týkajících se globálních klimatických změn.

Príspevek byl vypracován v rámci projektu Institut environmentálních technologií, reg. č. CZ.1.05/2.1.00/03.0100 podporovaného Operačním programem Výzkum a vývoj pro Inovace, financovaného ze strukturálních fondů EU a ze státního rozpočtu ČR a za přispění SGS 16/PřF/2011.

5P15 QM/MM STUDIES OF HAIRPIN RIBOZYME SELF-CLEAVAGE SUGGEST THE FEASIBILITY OF MULTIPLE COMPETING REACTION MECHANISMS INVOLVING IONIZED FORMS OF NUCLEOTIDES G8 AND A38

Vojtěch Mlýnský,¹ Pavel Banáš,¹ Nils G. Walter,² Jiří Šponer,³ and Michal Otyepka¹

¹Regional Centre of Advanced Technologies and Materials, Department of Physical Chemistry, Faculty of Science, Palacky University, tr. 17 listopadu 12, 771 46, Olomouc, Czech Republic

²Department of Chemistry, Single Molecule Analysis Group, University of Michigan, 930 N. University Avenue, Ann Arbor, Michigan 48109-1055

³Institute of Biophysics, Academy of Sciences of the Czech Republic, Kralovopolska 135, 612 65 Brno, Czech Republic

The hairpin ribozyme does not require metal ions for catalysis. Accordingly, guanine 8 (G8) and adenine 38 (A38) have been identified as key participants of ribozyme self-cleavage.[1] We here have carried out high-precision hybrid quantum-mechanical/molecular mechanical (QM/MM) calculations to evaluate putative reaction pathways.[2,3] The initial nucleophile attack of the A-1(2'-OH) group on the scissile phosphate is predicted to be rate-limiting in all mechanisms of low barrier height. The protonated A38H⁺ does not significantly affect the activation barrier of the rate-limiting nucleophilic attack (21.0 kcal/mol), but decreases the activation barrier of the exocyclic cleavage step by 7.7 kcal/mol. An unprotonated G8⁻ (together with A38H⁺) also yields a feasible activation barrier (20.4 kcal/mol), in contrast to inclusion of a G8-enol tautomer. We also show that proton transfer to a non-bridging phosphate oxygen is a feasible reaction pathway. We conclude that self-cleavage of the hairpin ribozyme may follow several competing microscopic reaction mechanisms.

This work was supported by the Academy of Sciences of the Czech Republic [grant numbers AVOZ50040507, AVOZ50040702], by the Ministry of Education of the Czech Republic, [grant number LC06030], by the Grant Agency of the Academy of Sciences of the Czech Republic [grant number IAA400040802], by Student Project PrF_2011_020 of Palacky University, and Grant Agency of the Czech Republic [grant numbers P208/10/2302, 203/09/1476, P208/11/1822, P301/11/P558 and 203/09/H046]. This work has been also supported by the Operational

Program Research and Development for Innovations - European Social Fund (CZ.1.05/2.1.00/03.0058 and CZ.1.07/2.3.00/20.0017) and by NIH grant.

- [1] M. J. Fedor, *Annu. Rev. Biophys.* 38 (2009).
 [2] P. Banáš, L. Rulíšek, V. Hánošová, D. Svozil, N.G. Walter, J. Šponer and M. Otyepka, *J. Phys. Chem. B* 112 (2008).
 [3] P. Banáš, P. Jurečka, N. G. Walter, J. Šponer and M. Otyepka, *Methods* 49 (2009).

PREDNÁŠKY - SEKCIA 6 CHEMPROGRESS

6P01

LABORATÓRNA, POLOPREVÁDZKOVÁ A PREVÁDZKOVÁ PYROLÝZA OJAZDENÝCH PNEUMATÍK NA CHEMIKÁLIE A PALIVÁ NA SLOVENSKU

Martin Bajus, Elena Hájeková

*Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU,
Radlinského 9, 812 37 Bratislava,
martin.bajus@stuba.sk*

Porovnávajú sa výsledky z pyrolýzy ojazdených pneumatík získaných za laboratórnych (gramová), poloprevádzkových (kilogramová) a prevádzkových podmienok (15.000 t/r). Modelovanie v teplotnom intervale 400-700°C sa uskutočnilo vo vsádzkovom a prietochnom reaktore s rôznym presadením východiskovej suroviny. Za laboratórnych podmienok pri 450°C sa získalo 1,4-11,1% (hmotn.) plynov, 6,4.-50,0% kvapalných produktov a 6,1 – 46,3% tuhých zvyškov (koku). Kvapalné podiely obsahujú cenný limonén, ktorého výťažky sú na úrovni 9% (hmotn.). Proces je energeticky sebestačný. V prchavých produktoch majú dominantné zastúpenie uhľovodíky od metánu až po vysokomolekulárne aromatické uhľovodíky. Z neuhľovodíkových zložiek je prítomný oxid uhoľnatý a oxid uhličitý. S rastúcou teplotou pyrolýzy výťažky izoprénu a benzénu v C₇ – C₁₀ frakcii klesajú. Tuhé pyrolýzne produkty majú charakter koku so špecifickým povrchom 60 – 70 m²/g. V súčasnosti riešime problém valorizácie kvapalných (odsírovanie) a tuhých produktov (aktivácia) za účelom ich širšieho využitia.

Ďakujeme grantovej agentúre Slovenskej republiky VEGA za finančnú podporu výskumného projektu № 1/0012/09.

- [1] Bajus M., Olahová N. : (2011) Thermal Conversion of Scrap Tyres, Petroleum and Coal 53 (2),1-7
 [1] Bajus M., Olahová N. : (2011) Pyrolýza ojazdených pneumatík, Zborník prednášok, Aproxem 2011, 1. diel, 163-171 z 20. Chemicko-technologické konferencie s medzinárodnou účasťou, Kouty nad Desnou, Česká republika.

6P02

ANALÝZA PYROLÝZY VYSOKOVROUCÍCH SUROVIN MATEMATICKÝM MODELEM S AUTOMATICKÝM GENEROVÁNÍM SÍTĚ REAKCÍ

Petr Zámstný¹, Adam Karaba¹, Zdeněk Bělohlav¹

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

V procese ethylenové pyrolýzy se často jako pyrolýzní suroviny využívají výševroucí ropné frakce, obvykle atmosférické plynové oleje (APO) a destilační zbytky z hydrokrakování vakuových olejů (HCVD). Pro analýzu vztahů mezi v praxi běžnými charakteristikami a výtěžky produktů laboratorní pyrolýzy byly využito celkem 22 vzorků APO a 6 vzorků HCVD. Aby bylo možné hlouběji posoudit rozdílné chování surovin APO a HCVD, byly vybrané standardní vzorky obou surovin rozděleny destilací na několik frakcí a ty pak podrobeny analýze jejich složení včetně pyrolytického rozkladu. Každá z frakcí byla zanalyzována metodou IČ spektrometrie (n-d-M analýza) na obsah parafanických, naftenických a aromatických uhlíků. Dále bylo stanoveno skupinové složení frakcí MS metodou HC22. Každá studovaná

frakce byla zpyrolyzována v laboratorním pyrolýzním reaktoru a byly stanoveny výtěžky všech podstatných pyrolýzních produktů. Pozorované závislosti výtěžků produktů na složení suroviny ukázaly, že ani zastoupení uhlíku (n-d-M) ani skupinové složení nelze samostatně použít jako přesné kritérium pro předpověď výtěžků pyrolýzních produktů, jelikož obě tato kritéria nereflektují velikost molekul v surovině. Vliv velikosti molekuly na výtěžky produktů pyrolýzy látek daného skupinového složení byl proto podrobně analyzován pomocí matematického modelu využívajícího automaticky generované reakční sítě. Získané výsledky potvrdily výrazný vliv velikosti molekuly na výtěžky produktů při zachování stejného skupinového složení suroviny.

Výsledky v publikaci vznikly na základě částečné finanční podpory specifického vysokoškolského výzkumu (MŠMT č. 21/2011).

6P03

SPOLOČNE SPYNOVÁNÍ ROPNÝCH ZBYTKŮ A BIOMASY

doc. Ing. Jaromír Lederer, CSc.^a, Ing. Václav Veselý CSc.^b, Ing. Dušan Kovač^a

^aVýzkumný ústav anorganické chemie, a.s., Revoluční 84, 400 01 Ústí n. Labem, ČR,

jaromir.lederer@vuanch.cz

^b Ústav chemických procesů, AV ČR v.v.i., Rozvojová 135, 165 02 Praha 6, ČR, vesely@icpf.cas.cz

V poslední době, zejména v souvislosti s hlubokým odsířením motorových paliv, roste spotřeba vodíku. Současně jsou snahy využít pro petrochemii obnovitelné suroviny, zejména odpadní biomasu. Velké množství biomasy odpadá při výrobě jedlých olejů (a dále bionafty) z řepky. Odpadní řepkový šrot tak představuje potenciální zdroj pro chemické využití. Jednou z možností je jeho parciální oxidace (v čistém stavu nebo ve směsi s ropnými oleji) na syntézní plyn.

Cílem výzkumu bylo získat experimentální data na pilotní jednotce parciální oxidace, která je zmenšeným modelem reálné jednotky pro zplyňování mazutu a ropných zbytků na syntézní plyn resp. vodík v kyslíko-paní atmosféře. Pilotní jednotky se skládá z vyvíječe páry, zásobníku suspenze s biomasou, zplyňovacího reaktoru napájeného přes ko-anulární trysku, dále kvenče a vodního chladiče. Na tomto zařízení byly získávány syntézní plyny různého složení, přičemž se sledoval poměr vodíku a oxidu uhelnatého v závislosti na podmínkách a obsahu

řepkového šrotu v základové ropné vysokovroucí frakci – ten se pohyboval v rozmezí 5 až 15 % hmot..

Pro hodnocení pokusů zplyňování se zavedl parametr λ jako měřítko redukčních podmínek. Jako referenční stav je považováno ideální spalování, při kterém vzniká pouze oxid uhličitý a voda.

Při porovnání celkového výtěžku synplynu a dalších technologických podmínek se prokázalo, že dominantní vliv na celkovou produkci CO+H₂ má změna poměru palivo/kyslík.

V případě vybraných pokusů byly přidány do systému katalytické kovy ve formě solí niklu a železa. Bylo prokázáno, že při použití katalytických kovů dochází k nárůstu množství vodíku na úkor oxidu uhelnatého.

6P04

FISCHER-TROPSCHOVA SYNTÉZA - PŘÍPRAVA A HODNOCENÍ PRODUKTŮ

Vlastimil Rubáš¹, David Kubička¹, Lukáš Hora¹, Kamil Jiša², Pavel Šimáček³

¹Výzkumný ústav anorganické chemie, a. s., Areal Chempark Záluží, 436 70 Litvínov, e-mail:

lukas.hora@vuanch.cz

²Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, Dolejšova 3, 182 23 Praha, e-mail: kamil.jisa@jh-inst.cas.cz

³Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha, e-mail: pavel.simacek@vscht.cz

Fischer–Tropschova (FT) syntéza je příkladem heterogenní povrchově katalyzované reakce, jejímž výsledkem je široká škála produktů od C1 sloučenin až po vysokomolekulární vosky. Jako katalyzátory se v technologické praxi uplatňují látky na bázi železa nebo kobaltu.

V prezentovaném projektu je výzkum zaměřen na nízkoteplotní FT syntézu, která poskytuje lineární parafinické produkty s delším uhlovodíkovým řetězcem. Součástí řešení je příprava vhodných katalyzátorů na bázi Co (nosič Al₂O₃), palivářské a petrochemické hodnocení vlastností připravených produktů a testování možností jejich zpracování běžnými rafinérskými procesy.

V rámci projektu byla vyprojektována a postavena testovací jednotka umožňující provozování FT syntézy za různých podmínek. Jednotka pracuje při tlacích 18-20 bar a teplotách do 250 °C. Vlastí syntézní reaktor je tvořen čtyřmi trubkami s pevným ložem katalyzátoru. Produkty jsou odebírány v systému odlučovačů, kde dochází k primárnímu rozdělení vznikajících

produktů na pevné vosky, kapalné uhlovodíky a vodní fázi.

Katalyzátory pro FT syntézu jsou připravovány impregnačními postupy a charakterizovány pomocí TPR, RTG a BET. Byl sledován také vliv kalcinační atmosféry na vlastnosti katalyzátorů.

Základní hodnocení získaných produktů je prováděno pomocí GC v kombinaci s metodikou SIMDIS pro uhlovodíkové podíly a metodikou SPME-GC/MS.

Z hlediska rafinérského je ověřováno zpracování produktů FT syntézy v procesech hydrokrakování, fluidního katalytického krakování a pyrolýzy.

Tento projekt je řešen s finanční podporou Ministerstva průmyslu a obchodu České republiky, evidenční číslo projektu je 2A-3TP1/063. Autoři za finanční podporu děkují.

6P05 METHODOLOGY FOR IMPROVING ENERGY EFFICIENCY OF A CHEMICAL PLANT

Jaroslav Poživil, Vladimír Hanta

Prague Institute of Chemical Technology,
Technická 1905, 166 28 Praha 6, CR,
pozivilj@vscht.cz

This work presents the tool for analyzing energy efficiency of a chemical plant. Energy efficiency methodology is based on systematic approach. Procedure of improvement of energy efficiency proceeds as follows: (1) identification of all energy sources (physical, physical-chemical and chemical) and of all energy consumers; (2) decomposition of plant into zones where heat is utilized and into zones where heat is removed to no avail; (3) identification of opportunities to improving energy efficiency. It is advantageous to use simulation program HYSYS to evaluation of different modification to the process. Usage of methodology for improving energy efficiency is illustrated by an example of sulfuric acid plant. The plant was separated into two parts. Zone I includes technological sections of sulfur combustion and of sulfur dioxide oxidation, zone II includes section of air drying and sulfur trioxide absorption (see Fig. 1). In our contribution we shall present seven suggestions for the better energy efficiency, for the higher steam production. The results show that it is possible to use inexpensive measures for improving energy efficiency. Benefits are cost

reductions and environmental protection. Energy savings in every particular case were calculated.

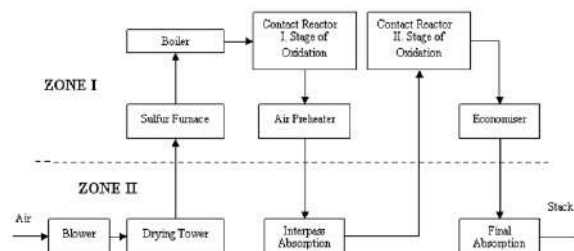


Fig. 1 Decomposition of double absorption sulfuric acid plant into zones

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] Heat recovery from concentrated sulfuric acid, D. R. McAlister, S. A. Ziebold - US Patent 4,576,813, 1986

6P06 NETRADIČNÉ VYUŽITIE SOLÁRNEJ ENERGIE

Anna Michalíková¹, Jozef Fiala¹

¹Ústav bezpečnostného a environmentálneho inžinierstva, MTF STU so sídlom v Trnave, Botanická 49, 917 08 Trnava

Využívanie slnečnej energie je dnes najčistejším spôsobom využívania energie vôbec a na rozdiel od iných zdrojov sú dopady na okolité životné prostredie zanedbateľné.

Slnečnú energiu, dopadajúcu na zemský povrch, možno využívať aktívnymi, pasívnymi a biologickými spôsobmi. Pod aktívnymi spôsobmi sa rozumie premena slnečného žiarenia na teplo alebo elektrickú energiu [1]. Fotovoltika je súbor technológií, ktoré s využitím polovodičových materiálov premieňajú slnečné svetlo (fotóny) na elektrinu. Fotovoltika sa stala jedným z najrýchlejších sa rozvíjajúcim odborom. Existujú rôzne netradičné možnosti využitia slnečnej energie. Mnohé sú vo fáze výskumu, overovania a zdokonaľovania, niektoré sú už dnes technicky zvládnuté, napríklad výroba vodíka, palivové články, chladenie prostredníctvom slnečnej energie a mnohé iné [2].

Na Ústave bezpečnostného a environmentálneho inžinierstva Materiálovotechnologickej fakulty STU so sídlom v Trnave je inštalovaný fotovoltický systém, pre ktorý sa overovali možnosti jeho využitia pre elektrochemickú

produkcii vodíka, elektrochemickú produkciu chlóru a technológie galvanického medenia a niklovania [3]. Z doterajších výsledkov vyplýva, že keď sa zabezpečí stabilita napätia potrebná pre procesy akumuláciou elektrickej energie z fotovoltických panelov, sú tieto vo veľmi dobrej zhode s výsledkami pri použití zdrojov napätia napájaných z verejnej elektrickej siete.

Príspevok bol spracovaný v rámci projektu APVV LPP-0171-07 Prírodné javy v experimentoch pre malých a veľkých, OPVaV-2008/2.2/01-SORO (ITMS 26220220056) „Hybridný elektrický zdroj pre technicko-poradenské laboratórium využitia a propagácie obnoviteľných zdrojov energie“

- [1] BOLEMAN, T., FIALA, J. *Obnoviteľné zdroje energie*. TRNAVA: 2009. 74 s., ISBN: 978-80-89422-07-4
- [2] LUGUE, A., HEGEDUS, S. *Handbook of Fotovoltaic Science and Engineering*. John Wiley & Sons Ltd, 2003. ISBN 0-471-49196-9
- [3] Solar Laboratory. *Fotovoltický solárny systém* [online]. [cit. 2011-06-16, 11:50 SEČ]. Dostupné na internete: <http://www.solarlab.mtf.stuba.sk/fotovoltika.html>

6P07 DVOJROZMĚRNÝ DYNAMICKÝ MATEMATICKÝ MODEL DEGRADACE KATALYTICKÉ VRSTVY V PALIVOVÉM ČLÁNKU TYPU PEM

Monika Draxselová¹, Roman Kodým¹, Svein Sunde², Karel Bouzek¹

¹Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Fakulta chemické technologie, Ústav anorganické technologie

Technická 5, 166 28 Praha, Česká Republika, draxselm@vscht.cz

²Norwegian University of Science and Technology, Department of Materials Science and Engineering, N-7491 Trondheim, Norway, svein.sunde@material.ntnu.no

Palivové články jsou považovány za vysoce efektivní zařízení umožňující přeměnu chemické energie na elektrickou. Značná pozornost se soustřeďuje zejména na palivové články s protonově vodivou membránou (PEMFC), které představují perspektivní zdroje energie pro automobily a jiné mobilní aplikace. Mezi faktory, které brání jejich komerčnímu využití, se řadí vysoká cena a krátká životnost. Pokles výkonu PEMFC je spojován především s degradací použitých materiálů a s nečistotami obsaženými ve vstupujících plynech [1]. Značný podíl na snížení výkonu PEMFC má pak degradace

katalytické vrstvy, přičemž nejvýrazněji se projevuje rozpouštění a redistribuce Pt katalyzátoru uvnitř zařízení [2]. Jedná se o komplexní problém, jehož experimentální studium je obtížné. Matematické modelování představuje alternativní přístup k pochopení tohoto problému.

V rámci této práce byl navržen dvojrozměrný makrohomogenní dynamický model jedné cely palivového článku. Popis katalytických vrstev byl založen na teorii trojrozměrné porézní elektrody. Transport plynů v palivovém článku byl založen na teorii ideálních plynů. Migračně-difuzní transport Pt²⁺ byl popsán Nernstovou-Planckovou rovnicí vycházející z teorie zředěných elektrolytů. Pro výpočet lokálních hodnot potenciálu byla použita Laplaceova rovnice. Model předpokládá tři mechanismy degradace: elektrochemické a chemické rozpouštění Pt a elektrochemickou oxidaci Pt na PtO. Výsledný systém parciálních diferenciálních rovnic byl řešen metodou konečných prvků v prostředí softwaru COMSOL MultiphysicsTM.

Financováno v rámci účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum MŠMT (Rozhodnutí č. 21/2011) a projektu DEMMEA, projekt číslo FCH-JU-2008-1, No. 245156.

- [1] J.Wu et al.: *Journal of Power Sources*, (2008)
- [2] R.M. Darling, J.P. Meyers: *Journal of The Electrochemical Society*, (2003)

6P08 PŘÍPRAVA DICYKLOHEXYLAMÍNU HYDROGENÁCIU DIFENYLAMÍNU

Peter Toman¹, Štefan Wenchich¹, Ján Uhlár¹

¹ VUCHT a. s. Nobelova 34, 836 03 Bratislava

Dicyklohexylamín (DCHA) je důležitou surovinou pre priemyselnú syntézu urýchľovačov sírnej vulkanizácie a prípravu antikoroziívnych prípravkov. Jeho najrozšírenejší priemyselný postup výroby je úzko spätý s výrobou anilínu a cyklohexylamínu. Dicyklohexylamín sa v tomto prípade získava ako vedľajší produkt hydrogenácie anilínu na cyklohexylamín. [1], [2]. Alternatívnym postupom je príprava DCHA hydrogenáciou difenylamínu (DFA). Katalyzátormi hydrogenácie DFA na DCHA sú hlavne vzácne kovy, ale aj katalyzátory na báze Co a Ni [3]. Nevýhodou aktívnejších Ni katalyzátorov v porovnaní s Co katalyzátormi je ich nižšia selektivita v dôsledku ich väčšieho sklonu k hydrogenolyze väzby C-N. Co katalyzátor možno aktivovať priamo v reakčnej

zmesi ako aj osobitne pred hydrogenáciou vodíkom. Veľkým prínosom aktivovaného Co katalyzátora je vysoká selektivita vzniku DCHA (98 - 99%) a úplná konverzia DFA. Ďalšou nespornou výhodou aktivovaného Co katalyzátora je jeho životnosť, resp. možnosť jeho recyklácie do čerstvej reakčnej zmesi bez predchádzajúcej úpravy/aktivácie. V prípade priemyselnej realizácie procesu hydrogenácie možno pracovať vsádzkovým spôsobom v miešanom reaktore so suspenzným katalyzátorom, alebo kontinuálne v reaktore s pevne uloženým formovaným (napr. tabletovaným) katalyzátorom.

Táto práca bola podporovaná Ministerstvom školstva, vedy, výskumu a športu SR v zastúpení Agentúrou Ministerstva školstva, vedy, výskumu a športu SP pre štrukturálne fondy EÚ, projekt: „Hydrogenácie v kvapalnej fáze“, ITMS kód projektu 26220220144, Aktivita 1.1: Vybudovanie a výskumné využitie experimentálnej hydrogenačnej jednotky.

[1] CS 101 478 (1961), CA 59: 2672c

[2] CS 218 989 (1982)

[3] US 4,057,513 (1977)

6P09

VÝVOJ KERAMICKÝCH NOSIČŮ KATALYZÁTORŮ PRO ANODICKÝ VÝVOJ KYSLÍKU V ELEKTROLYZÉRU PRO ROZKLAD VODY S POLYMERNÍM ELEKTROLYTEM

Jakub Polonský¹, Carsten Prag¹, Aleksey Nikiforov¹, Irina Petrushina¹, Erik Christensen¹

¹Technical University of Denmark, Kemitorvet, Bygning 207, 2800 Lyngby, Denmark, jpolonsky@gmail.com

Byla vyvinuta nová metoda pro testování stability nosiče anodového katalyzátoru určeného pro elektrolytický rozklad vody v elektrolyzéro s polymerním elektrolytem (PEMWE). Tato metoda je založena na sledování koroze nosiče ve směsi CF₃SO₃H a H₂O₂ při 130 °C. Míra koroze je následně zjištěna stanovením rozpuštěných iontů metodou ICP-MS. Tomuto testování byly podrobeny čtyři keramické nosiče: TaC, Si₃N₄, WB a Mo₂B₅. Bylo zjištěno, že z těchto materiálů je v daném prostředí nejstabilnější TaC. Následně byl metodou Adamsovy fúze [1] deponován na povrch tohoto nosiče katalyzátor ve formě (IrO₂)_x(TaC)_{1-x}, kde *x* je hmotnostní zlomek IrO₂. Hodnota *x* nabývala postupně hodnot 0,1, 0,3, 0,5, 0,7, 0,9 a 1. Pro elektrochemická testování připravených katalyzátorů byla použita metoda

tenkého filmu [2]. Katalyzátory byly testovány cyklickou voltametrií a Tafelovou analýzou. Dále byly podrobeny charakterizaci pomocí adsorpce N₂ (BET), XRD fázové analýzy, SEM-EDX a byla stanovena jejich prášková elektronová vodivost. TaC byl navíc charakterizován pomocí termogravimetrické a diferenciální teplotní analýzy. Výsledky analýz ukázaly, že katalyzátory s *x* < 0,5 mají nižší specifickou aktivitu, zatímco ty s *x* ≥ 0,5 žádný pokles aktivity nevykázaly. TaC se tak ukázal jako vhodný nosič katalyzátorů pro PEMWE.

Za finanční podporu děkujeme Evropské komisi v rámci 7th Framework Programme (Projekt 212903, WELTEMP), Danish Council for Strategic Research (Center for Renewable Hydrogen Cycling, HyCycle, Contract No. 2104-07-0041), programu mobility studentů EU Erasmus a účelové podpore na specifický vysokoškolský výzkum MŠMT (Rozhodnutí č. 21/2011).

[1] Adams R, Shriner RL. Platinum oxide as a catalyst in the reduction of organic compounds. III. Preparation and properties of the oxide of platinum obtained by the fusion of chloroplatinic acid with sodium nitrate. *J Am Chem Soc* 1923;45:2171-2179.

[2] Schmidt TJ, Gasteiger HA, Stab GD, Urban PM, Kolb DM, Behm RJ. Characterization of High-Surface-Area Electrocatalysts Using a Rotating Disk Electrode Configuration. *J Electrochem Soc* 1998;145:2354-2358.

6P10

CHARAKTERIZACE ANION SELEKTIVNÍCH HETEROGENNÍCH MEMBRÁN

Matin Prokop¹, Jaromír Hnát¹, Martin Páidar¹

¹Ústav anorganické technologie, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28, Praha 6, prokopm@vscht.cz

Uplatnění nalézají iontově selektivní membrány především v separačních procesech, například při odsolování brakické nebo mořské vody. Jejich další uplatnění je v membránových palivových článcích, či membránové elektrolyze solanky.

Ze strukturního hlediska se uplatňují dva typy iontově výměnných membrán: heterogenní a homogenní. Homogenní membrány dosahují obecně lepších elektrochemických vlastností. Výhodou heterogenních membrán oproti homogenním je jejich lepší cenová dostupnost. Heterogenní membrány jsou tvořeny iontově selektivní fází fixovanou v polymerní matici. Druh a poměr jednotlivých složek určuje mechanické a separační vlastnosti membrány.

V rámci této práce byly sledovány vybrané vlastnosti experimentálních membrán, určených primárně pro alkalickou elektrolýzu vody: iontová vodivost, iontově výměnná kapacita a pevnost v tahu.

Iontová vodivost membrány byla měřena v čtyřelektrodovém (v podélném směru) nebo dvouelektrodovém (v příčném směru) zapojení. Při měření v příčném uspořádání je měřen odpor v celém průřezu membrány a díky tomu získaná data více odpovídají reálným podmínkám. Porovnáním příčné a podélné vodivosti byl sledován nežádoucí vliv tzv. skinové vrstvy na povrchu membrány. Iontově výměnná kapacita byla měřena potenciometrickou titrací iontů vytěsněných z membrány. Dále byly sledovány strukturální a mechanické vlastnosti membrán. Na základě získaných dat bylo nalezeno optimální složení membrány s ohledem na její elektrochemické a mechanické vlastnosti.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum MŠMT (Rozhodnutí č. 21/2011)

6P11 BEZPEČNÁ VYSOKOFREKVENČNÁ VENTILÁCIA, ELIMINÁCIA RIZÍK NOZOKOMIÁLNYCH NÁKAZ A BIOKOMPATIBILITA POVRCHOVEJ ÚPRAVY INOVAČNÝCH MATERIÁLOV

Eleonóra Benčíková¹, Marián Berešík²

¹Fakulta špeciálneho inžinierstva, Žilinská univerzita, Ul. 1 mája 32, 010 26 Žilina,

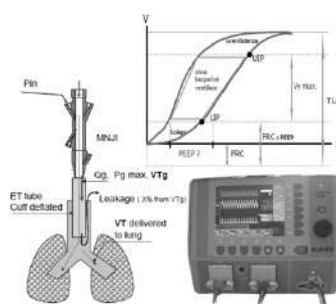
E.Bencikova@fsi.uniza.sk

²Klinika AIM, ÚVN SNP Ružomberok-FN, Generála Miloša Vesela 21, 034 26 Ružomberok.

Vysokofrekvenčná ventilácia (VFV) je taký spôsob umelej ventilácie pľúc, pri ktorom sa používajú suprafiziologické frekvencie ventilačných plynov. Problémy identifikácie rizikových pacientov z hľadiska pľúcnych komplikácií, ich špeciálna predoperačná príprava, pooperačná starostlivosť, rozpoznanie rizikových faktorov perioperačného obdobia a možnosti ich eliminácie čakajú dodnes na riešenie. Vysokofrekvenčná ventilácia v porovnaní s konvenčným režimom je vzhľadom k nižším tlakovým amplitudám považovaná za menej invazívnu z hľadiska rizika barotraumy. Hlavným prínosom je i nižšia incidencia nozokomiálnej pneumonie, skrátenej dĺžky hospitalizácie a zníženie liečebných nákladov. Biokompatibilita môže byť opísaná ako viacfaktorová, rôzne materiálové vlastnosti vplývajú na reakciu

hostiteľského prostredia. Infekcia nozokomiálnymi často polyrezistentnými patogénmi spôsobuje morbiditu, mortalitu následkom zlyhania liečby a zvýšené náklady antibiotík vzhľadom na tendenciu týchto infekcií k relapsu. Vysokú mieru aktuálnosti pri znižovaní prenosu infekčného agens zo zdroja nákazy na vnímavého hostiteľa má naviazanie chlorhexedínu a sulfadiazínu striebra po celej dĺžke povrchu katétra.

Príspevok je zameraný na implementáciu inovačných materiálov v zdravotníckych zariadeniach zabezpečujúcich bezpečnosť pacienta pri VFV v maximálnej miere eliminovať riziká nozokomiálnych nákaz (NN) ohrozujúcich ľudské zdravie.



Obr. 1 Vysokofrekvenčný ventilátor PARAVENT PATd [3]

Táto práca vznikla za podpory KALAS Medical, s.r.o.

[1] Benčíková, E., Berešík, M.: Chem.Listy 104, 560-565 (2010).

[2] Noyal Mariya Joseph et al.: J Infect Dev Ctries 4(4), 218-225, (2010).

[3] <http://www.kalas.sk>, stiahnute 13.06.2011.

6P12 VLASTNOSTI NAFIONU ZA ZVÝŠENÉHO TLAKU A TEPLoty

Jakub Malíš¹, Martin Páidar¹, Karel Bouzek¹

¹VŠCHT-Praha, Ústav anorganické technológie, Technická 5, 166 28, Praha 6 - Dejvice, *jakub.malis@vscht.cz*

Elektrolýza vody je jednou z kľúčových technológií vodíkovej ekonomiky. V súčasnej dobe je priemyselne používaná elektrolýza alkalická. Alternatívni kyselá membránová elektrolýza vody využíva polymerný elektrolyt na bázi perfluorovaných sulfonovaných polymerů typu Nafion, vykazujúci vysokou chemickou a mechanickou odolnosť. V súčasnosti nebola nájdená iná skupina membrán, ktoré by spĺňovali požiadavky pro membránovú elektrolýzu vody odpovídajícím způsobem.

Zlepšení kinetiky elektrodoých reakcí a snížení náložek katyzátorů na bázi platinových kovů lze dosáhnout zvýšením provozní teploty. Při teplotách nad 100°C však dochází při atmosférickém tlaku k vysychání polymerního elektrolytu, který se tak stává nevodivým. Zvýšením provozního tlaku lze zvýšit teplotu varu a zamezit tak vysychání membrány.

Pro tyto podmínky však daná membrána nebyla vyvinuta a vyvstává tak řada otázek. Všeobecný předpoklad ztráty vodivosti Nafionu z důvodu chemické degradace, za uvedených podmínek nebyl nikdy prokázán. Proto byla iniciována studie mající za cíl určit příčiny a mechanismus degradace a určit rozsah podmínek, za kterých může membrána pracovat, případně možnost jejího dalšího rozšíření.

V rámci této práce byla stabilita Nafionu testována při teplotách do 150°C a tlacích do 700 kPa v prostředí kapalné vody. V průběhu testů byla sledována zejména vodivost membrány metodou elektrochemické impedanční spektroskopie a změny její morfologie a chemické struktury.

Projekt vznikl za podpory Evropské komise v rámci projektu Weltemp No.212903 a Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky No.7E08003.

6P13 ALKALICKÁ ELEKTROLÝZA VODY S MEMBRÁNOU NAFION

Karel Vazač¹, Martin Páidar¹, Karel Bouzek¹

¹*Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6 – Dejvice, ČR, vazack@vscht.cz*

Vodík je stále častěji zmiňován jako palivo budoucnosti, které dříve či později nahradí fosilní paliva. V současnosti se však vodík vyrábí právě především z fosilních paliv a pouze malá část vodíku se získává elektrolyzou z vody a to z důvodu vysoké energetické náročnosti tohoto procesu. Proto je potřeba hledat možnosti zvyšující konkurenceschopnost elektrolyzy vody. V současnosti nachází průmyslové uplatnění především alkalická elektrolyza vody.

Nejvíce problematickou částí alkalické elektrolyzy vody je bezesporu azbestová diafragma použitá jako separační přepážka. Vedle toxicity její tloušťka způsobuje značnou odporovou ztrátu. Tento nedostatek může být kompenzován např. nahrazením diafragmy anexovou polymerní membránou, nebo použitím

elektrolyzy kyselé využívající jako separační přepážku katexovou membránu Nafion. Tato řešení dokáží výrazně zlepšit energetické parametry. Mají ovšem i své nedostatky: Ať se již jedná o nízkou teplotní stabilitu anexových membrán nebo nutnost použití velmi drahých katalyzátorů u kyselé elektrolyzy. Alternativním řešením je použití Nafionu v alkalické elektrolyze. Toto uspořádání umožňuje pracovat s tenkou membránou a zároveň za zvýšené teploty podporující rychlost elektrodoých reakcí. Na druhou stranu zde vyvstává nový problém v podobě nižší mobility Na⁺ (K⁺) iontů skrz Nafion. Tato práce se věnuje studiu uvedené problematiky. Dosažené výsledky naznačují ekonomickou realizovatelnost procesu.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum MŠMT (Rozhodnutí č. 21/2011).

6P14 VLIV ANION-SELEKTIVNÍHO POLYMERNÍHO POJIVA NA VLASTNOSTI ANODY OBSAHUJÍCÍ NEPLATIONOVÉ KATALYZÁTORY PŘI ALKALICKÉ ELEKTROLÝZE VODY

Karel Bouzek¹, Jaromír Hnát¹, Martin Páidar¹,
Jana Jiroušová¹, Jan Schauer², Jan Žitka²

¹*Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha, karel.bouzek@vscht.cz*
²*Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i, Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha, schauer@imc.cas.cz*

Alkalická elektrolyza vody představuje již celou řadu desetiletí zavedený průmyslový proces produkující vodík o vysoké čistotě [1]. Takto vyrobený vodík je využíván zejména v potravinářském průmyslu ke ztužování tuků. Avšak díky své vysoké čistotě je také perspektivním nosičem energie využitelným například v palivových článcích. Přes své dlouhodobé využití nebyla tato technologie již několik dekad dále rozvíjena. Pracovní prostředí tedy stále představuje až 30 hm % roztok KOH, jako separátor vznikajících plynů slouží azbestová diafragma, elektrody jsou niklové nebo poniklované ocelové. Z tohoto vyplývají tři zřejmé směry možného zefektivnění současné technologie; 1) snížení pracovní koncentrace KOH pro zvýšení životnosti používaných materiálů, 2) náhrada azbestové diafragmy jiným vhodným separátorem a 3) použití vhodných katalyzátorů elektrodoých reakcí. Tato práce navazuje na předcházející studie, které se

zabývaly charakterizáci vhodných materiálov použiteľných jako náhrada azbestovej diafragmy a venuje sa príprave a charakterizácii elektrod s vhodným elektrodovým katalyzátorm. V rámci práce byly porovnávané čisté niklové elektrody a elektrody modifikované katalyzátory. V prípade elektrod s katalytickou vrstvou byl v jednom prípade jako pojivo použit PTFE, v druhém prípade bylo použito anion-selektivní pojivo, jehož účelem bylo zajistit nezbytný třífázový kontakt i v prostředí KOH o velmi nízké koncentraci.

Tento výzkum probíhá za finanční podpory Ministerstva průmyslu a obchodu ČR v rámci projektu číslo: FR-TI2/442.

[1] Häussinger P, Lohmüller R, Watson AM (2000) Hydrogen. Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. Wiley Online Library

6P15

POVRCHOVÉ A ADHÉZNE VLASTNOSTI SUBSTRÁTOV V SPOJI DREVOTRIESKOVÁ DOSKA - PVC FÓLIA LEPENOM POLYURETÁNOVÝM ADHEZÍVOM

Igor Novák¹, Vladimír Vanko², Jozef Preťo², Zuzana Hloušková¹, Ivan Chodák¹

¹Ústav polymérov, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, upolnovi@savba.sk

²VIPO, a.s., Gen. Svobodu 1069/4, 958 01 Parížanske

Pri výrobe nábytku sa v súčasnosti často využíva lepenie PVC fólií na strednohustotnú drevotrieskovú dosku (MDF) s použitím polyuretánových (PUR) vodných disperzií. Teoretickú pevnosť adhézneho spoja MDF - PUR adhezívum - PVC možno zistiť na základe stanovenia povrchových a medzifázových parametrov oboch použitých substrátov a adhezíva [1]. Z medzifázových parametrov je dôležitá rovnovážna práca adhézie a medzifázové napätie v systéme MDF - PUR adhezívum a PUR adhezívum - PVC. Na dosiahnutie vysokej pevnosti adhézneho spoja musia polarita oboch substrátov dosahovať blízku hodnotu [2]. Za tohto predpokladu je hodnota medzifázového napätia v spoji veľmi malá a hodnota rovnovážnej práce adhézie je vysoká. Merania povrchových vlastností adhézneho spoja MDF-PUR adhezívum-PVC potvrdili pomerne veľký rozdiel v polaritách medzi PUR adhezívom a MDF ako aj medzi PUR adhezívom a PVC. Na dosiahnutie vyššej pevnosti adhézneho spoja je potrebné

zvýšiť polaritu MDF a tiež aj PVC fólie tak, aby sa polarita týchto substrátov priblížila k polarite PUR adhezíva. Tento cieľ je možné dosiahnuť povrchovou modifikáciou oboch substrátov nízkoteplotnou bariérovou alebo rádiov-frekvenčnou plazmou elektrického výboja. Zistené hodnoty rovnovážnej práce adhézie v skúmanom spoji boli porovnané s pevnosťou adhézných spojov v odlupovaní a na základe výsledkov boli navrhnuté povrchové modifikácie substrátov, ktoré zabezpečia zvýšenie pevnosti spojov.

Príspevok bol vytvorený na základe projektu „Reinžiniering produktového portfólia VIPO a.s.“ (kód projektu z ITMS: 26220220091) v rámci operačného programu Výskum a vývoj podporeného Európskym fondom regionálneho rozvoja.

[1] I. Novák, V. Pollák, I. Chodák, Plasma Processes and Polymers 3 (2006) 355.

[2] I. Novák, M. Števiar, I. Chodák, I. Krupa, T. Nedelčev, M. Špírková, M. M. Chehimi, J. Mosnáček, A. Kleinová: Polym. Adv. Technol. 18 (2007) 97.

6P16

MOŽNOSTI NÁHRADY KARCINOGENNÝCH OLEJOV V GUMÁRENSKOM PRIEMYSLE

Milan Olšovský¹, Radovan Drábik¹, Branislav Cíbik²

¹Fakulta priemyselných technológií TnUAD, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov, milan.olsovsky@fpt.tnuni.sk

²Vipotest, s. r. o., prev. Púchov, T. Vansovej 1054/45, 020 01 Púchov

V súčasnosti sa používajú ako zmäkčovadlá gumárenských zmesí rôzne typy olejov [1, 2]. Niektoré typy minerálnych olejov obsahujú vysoké množstvo polycyklických aromatických uhlíkovodíkov (PAH), prítomných najmä v zmäkčovadlách. V konečnom výrobku sú obsiahnuté v rozličných množstvách. Benzo(a)pyrén (BaP) môže byť kvalitatívnym a kvantitatívnym ukazovateľom prítomnosti PAH. BaP a iné PAH sa klasifikujú ako látky karcinogénne, mutagénne a poškodzujúce reprodukciu. Preto v zmysle Smernice Európskeho parlamentu a rady č. 2005/69/ES zo 16. 11. 2005 bolo zakázané používať látky, ktoré obsahujú viac ako 2 % hmot. aromatických látok [3]. Týka sa to najmä ropných minerálnych látok. Preto sa stále hľadajú možné náhrady minerálnych olejov. Začínajú sa aplikovať rastlinné oleje a vosky a ich kombinácie. Smernica EÚ sa začala uplatňovať od 1. 1. 2010.

Oleje sa nesmú uvádzať na trh ani používať na výrobu plášťov, ak obsahujú viac ako 1 mg/kg BaP alebo viac ako 10 mg/kg celkového množstva PAH. Tieto limity sa považujú za dodržané vtedy, keď extrakt polycyklických aromatických (PCA) je menej ako 3 hmot. % podľa normy Inštitútu pre ropu IP 346: 1998.

- [3] DUCHÁČEK, V. - HRDLIČKA, Z: Gumárenské suroviny a jejich zpracování. Praha: VŠCHT, 2009. ISBN 978-80-7080-713-2.
- [4] PLITZ, J. - VOLDÁNOVÁ, J.: Náhrada oleje DAE v gumárenských smesích. In: Plasty a kaučuk, ISSN 0322-7340, 2011, roč. 48, č.1 - 2, s. 9 - 11.
- [5] Smernica Európskeho parlamentu a rady č. 2005/69/ES zo 16. 11. 2005. In: Úradný vestník Európskej únie (9. 12. 2005), s. L323/51 - L323/54.

6P17

SEPARACE TĚŽKÝCH KOVŮ Z ODPADNÍCH VOD V KOVOHUTÍCH PŘÍBRAM REDUKČNĚ-SORPČNÍM POSTUPEM

Ladislav Kudrlička¹, Jana Kovačová¹, Petr Pistulka², Vladimír Plucha²

¹Výzkumný ústav anorganické chemie, a.s., Revoluční 84, 400 01 Ústí nad Labem, ladislav.kudrlicka@vuanch.cz

²Kovohutě Příbram nástupnická, a.s., Příbram VI č.p. 530, 261 81 Příbram, pistulka@kovopb.cz

Separace těžkých kovů (TK) z vod patří ke standardně řešeným problémům oblasti ochrany životního prostředí.

Použitou dekontaminační technikou byla adsorpce TK na přírodních sorbentech s obsahem huminových látek v dynamicky uspořádané permeabilní reaktivní bariéře (PRB). Měření průběhu procesu a jeho matematický popis byly popsány v pracích [1,2].

Ověření experimentálních poznatků bylo provedeno pilotními testy v nadzemní PRB, situované v Kovohutích Příbram nástupnická, a.s. Vstupní vody měly vysoký obsah RAS s reakcí pH 9-10 a dominantním obsahem Tl a Cd, kolísajícím v rozsahu cca 50-150 mg/l. Vzhledem k obtížné imobilizaci Tl z OV byla zvolená technologie doplněna o konverzi obsahu TK v OV na obsah Zn²⁺ redukcí kovovým zinkem [3]. Použitým sorbentem pro imobilizaci Zn²⁺ z OV byl lignit z dolu Baňa Čáry o zrnitosti 5-10 mm. OV po zpracování měly reakci pH 6-7 s mírou separace TK vyšší než 97 %, přičemž výkon pilotní jednotky byl cca 20 % produkovaného množství OV.

V navazujícím výzkumu jsou řešeny otázky reaktorového uspořádání redukčně-sorpčního pochodu, způsoby regenerace Zn-náplně, materiálový výzkum konstrukčních prvků reaktoru, recyklace vyredukované směsi TK na využitelné produkty, čisté soli thallia případně kovové thallium.

Zneškodňování odpadů, nasyceného adsorbentu a meziproductů ze zpracování vyredukované směsi TK, je uvažováno spalováním a vnitřním recyklem.

Tento příspěvek byl vytvořen s podporou Ministerstva průmyslu a obchodu ČR, program TIP, ev. č. FR-TI3/187

- [1] Kudrlička, L., Kozler, J.: Model permeabilní reaktivní bariéry pro zachycování těžkých kovů z vodných roztoků na přírodním adsorbentu – oxyhumolitu. Odpadové fórum 2008, 16.-18.4.2008, Milovy. In: Odpadové fórum 2008. 2. díl, Praha : PCHE - PetroChemEng, 2008, s. 4227-4233. ISBN 978-80-02-02012-7.
- [2] Kudrlička, L., Kolesárová, J., Kozler, J.: Měření a vyhodnocování dynamické adsorpce těžkých kovů na přírodních sorbentech s obsahem huminových látek. 61. Zjazd chemikov, 7.-11. 9. 2009, Tatranské Matliare. In: ChemZi 5/9 2009, s. 114. ISSN 1336-7242.
- [3] Kudrlička L., Kolesárová J., Macas J.: Způsob odstraňování thallia, případně thallia a kadmia, z kontaminované vody zinkem. PV č. 2010-888, podaná na Úřadu průmyslového vlastnictví ČR dne 2. prosince 2010.

6P18

SPOLUPRÁCE AKADEMICKÉ SFÉRY S PRŮMYSEM HRST POCITŮ, ÚVAH A ZKUŠENOSTÍ

Bohumil Kratochvíl

Ústav chemie pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, bohumil.kratochvil@vscht.cz

V příspěvku jsou shrnuty mnohaleté zkušenosti autora se spoluprací s průmyslovou (aplikační) sférou, které se pokusil generalizovat.

Výzkum v akademické sféře je primárně financovaný státem a národními (nadnárodními) grantovými agenturami. Kromě toho existuje i možnost financování výzkumu průmyslovými subjekty. Stát vyvíjí na badatele určitý tlak, aby výzkum směřoval k praktické aplikaci. Tento tlak však není likvidační, protože akademická sféra je orientována především na základní výzkum. Výzkum financovaný průmyslovými subjekty je

přísně aplikační, více či méně utajený, striktně limitovaný termíny a většinou nepublikovatelný, což je v kolizi s politikou grantových agentur, VŠ a Akademie věd. Průmyslová sféra si, po své informační linii, vybere badatele k řešení svého problému nebo badatele, který je schopen ji něco zajímavého nabídnout (badatel je dostatečně známý a zviditelněný svými aktivitami v oboru). V průmyslu se badatel málokdy dostane k základnímu výzkumu. Od akademického badatele, spolupracujícího s průmyslovými subjekty, je požadována především pružná a rychlá reakce na zadání a potřeby zadavatele (např. na vyřešení problému je vázán nákup suroviny). Způsobnost a kvalifikace badatele je ze strany průmyslového partnera často auditována (většinou vysoce postaveným zahraničním expertem zadavatele). Na druhé straně však spolupráce s průmyslem nutně nevyžaduje akreditované laboratoře a často přináší materiál ke studiu, ke kterému by se akademický badatel jen těžko dostal jinak. Konečně, administrativní spolupráce s průmyslovou sférou je bezesporu jednodušší než u grantových agentur.

Nejlepší variantou je ovšem mít jak grantové projekty, tak spolupráci s průmyslovými (aplikačními) partnery.

Příspěvek vznikl za podpory projektu MŠMT č. MSM6046137302.

6P19 SOUČASNOST A PERSPEKTIVY ODBORNÉ SKUPINY TERMICKÉ ANALÝZY

Petra Šulcová a Jiří Málek

*Fakulta chemicko-technologická, Univerzita
Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, E-
mail: petra.sulcova@upce.cz*

Vznik odborné skupiny je datován do roku 1972, a byl inspirován založením Mezinárodní konfederace pro termickou analýzu (ICTA) v Aberdeenu v roce 1965 (ICTAC od r. 1992) a také vznikem termoanalytické skupiny na Slovensku (1972). Národní skupina je členem celosvětově působící odborné společnosti International Confederation for Thermal Analysis and Calorimetry, která je asociovaná s IUPAC. Odborná skupina organizuje semináře, které jsou zaměřeny na teoretické základy a přístrojovou techniku pro termickou analýzu. Skupina se také podílela na organizování letních škol termické analýzy a ve spolupráci se slovenskými termoanalytiky na organizování konferencí o

termické analýze - TERMANAL. V roce 2011 se uskutečnil již 18. ročník, který byl zároveň 3. ročníkem společné česko-maďarsko-polsko-slovenské termoanalytické konference a byl organizován „Pracovní skupinou pro termickou analýzu a kalorimetrii na Slovensku“. Druhý ročník této společné konference se uskutečnil v roce 2009 v Zakopaném (Polsko) pod záštitou „Polish Society of Calorimetry and Thermal Analysis“. První společné setkání termoanalytiků ze „čtyř států“ uspořádala maďarská skupina v květnu 2007 (Sopron), které se uskutečnilo v rámci oslav 100. výročí založení Maďarské chemické společnosti. Další, v pořadí již 4. ročník, se uskuteční v Pardubicích (ČR) v roce 2013, který bude organizovat česká odborná skupina. Aktuální informace o odborné skupině jsou na: www.vscht.cz/ach/osta.

Autoři příspěvku děkují za finanční podporu MŠMT (projekt LG11027 realizující program INGO II).

6P20 GLYCEROL JAKO SUROVINA PRO VÝROBU KOMPONENT PRO MOTOROVÁ PALIVA

Ing. Jiří Kolena, CSc.^a, Ing. Pavel Morávek^a, Ing. Pavel Šimáček, PhD.^b

^a *Výzkumný ústav anorganické chemie, a.s., Revoluční 84, 400 01 Ústí n. Labem, ČR, jiri.kolena@vuanch.cz*

^b *Ústav technologie ropy a alternativních paliv VŠCHT, Praha 6, Technická 5, ČR, pavel.simacek@vscht.cz*

Produkce glycerolu v posledních letech ve světě zásadním způsobem vzrostla v důsledku rozvoje výroby metylesterů vyšších mastných kyselin (FAME), využívaných jako složka motorové nafty. Množství glycerolu odpadajícího při výrobě FAME činí kolem 10 až 12 % hm na vyrobenou bionaftu. Jsou proto hledány nové směry využití glycerolu mimo rámec výroby tradičních specialit. Kromě petrochemických výrob, kde nachází glycerol uplatnění jako náhrada tradičních surovin, může být novým směrem využití glycerolu i výroba kyslíkatých komponent pro motorová paliva.

Nejnadhjnější kyslíkatou komponentou pro motorová paliva na bázi glycerolu jsou étery, vznikající reakcí s izobutylenem na kyselých katalyzátorech, nejčastěji iontoměničích. Pro palivářské účely je využívána frakce diéterů a triéterů. Tyto étery spadají bodem varu do destilačního rozmezí motorové nafty. Jejich hlavní význam spočívá ve schopnosti snižovat

emise pevných částic při spalování motorové nafty.

V literatuře posledních let byla popsána řada variant postupů přípravy éterů glycerolu. Citlivou operací společnou většině postupů je destilační dělení surového produktu éterifikace. Při něm hrozí zpětný rozklad připravených éterů. Ve VÚANCH a.s. byl vyvinut postup výroby éterů glycerolu, který je založen na kombinaci extrakčního dělení surové směsi éterů v systému voda – nepolární rozpouštědlo a následně destilací získaných frakcí z extrakce. Postup je energeticky málo náročný a nehrozí při něm rozklad produktů.

Jinou potenciální kyslíkatou složkou do motorových paliv, vyrobiteľnou z glycerolu, jsou cyklické acetalu a ketaly. Bodem varu spadají nižší acetalu glycerolu do konce destilačního rozmezí benzinů (30 až 210 °C) a počátku destilačního rozmezí motorové nafty (180 až 370 °C). Výšealkylované acetalu pak do destilačního rozmezí motorové nafty. Acetalu glycerolu mají vysoké oktanové a nízké cetanové číslo. Podle některých údajů z literatury snižují přísady acetalu emise při spalování motorové nafty. Přídavek acetalu do motorové nafty má však za následek snížení cetanového čísla. Kromě negativního vlivu na cetanové číslo je nevýhodou acetalu i mísitelnost s vodou v některých případech i omezená mísitelnost s uhlovodíky. Rovněž vysoká cena druhé komponenty potřebné pro jejich přípravu (aldehyd, keton) nepodporuje naději na jejich širší palivářské využití.

6P21

SURFACE PROPERTIES OF POLY(IMIDE-CO-SILOXANE) - BASED ADHESIVES

Igor Novák¹, Petr Sysel², Ivan Chodák¹, Anton Popelka¹, Milena Špírková³, Angela Kleinová¹, Štěpán Florián¹

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

²*Department of Polymers, Institute of Chemical Technology, Technická 5, 166 28 Prague 6, Czech Republic, Petr.Sysel@vscht.cz*

³*Institute of Macromolecular Chemistry AS CR, Heyrovsky sq. 2, 162 53 Prague 6, Czech Republic, spirkova@imc.cas.cz*

The adhesives based on polyimide based copolymers, namely poly(imide-co-siloxane)

(PIS) have been investigated [1]. The surface of PIS block copolymers reaches the higher degree of hydrophobicity already at low content of polysiloxane in copolymer. This kind of copolymers are used as high-performance adhesives and coatings. The surface as well as adhesive properties of PIS block copolymers depends on the content and length of siloxane blocks. The surface properties [2] of PIS block copolymers are strongly influenced by enrichment of the surface with siloxane segments. Micro phase separation of PIS block copolymers occurs due to the dissimilarity between the chemical structures of siloxane, and imide blocks even at relatively low lengths of the blocks. An significant increase of roughness of PIS copolymer surface was observed, if the content of siloxane was growing. The contact angles of water extremely increased by rising of siloxane content in PSI block copolymer. The content of siloxane in PIS increased, the surface energy, and its polar component diminished, but the dispersive component of the surface energy on opposite increased. The content of siloxane in PIS rises up, the strength of adhesive joint to epoxy decreased almost linearly.

Príspevok bol vytvorený na základe projektu „Reinžiniering produktového portfólia VIPO a.s.“ (kód projektu z ITMS: 26220220091) v rámci operačného programu Výskum a vývoj podporeného Európskym fondom regionálneho rozvoja.

- [1] J. E. McGrath, D. L. Dunson, S. J. Mecham, J. L. Hedrick: *Adv. Polym. Sci.* 140 (1999) 61.
- [2] I. Novák, M. Števiar, I. Chodák, I. Krupa, T. Nedelčev, M. Špírková, M. M. Chehimi, J. Mosnáček, A. Kleinová: *Polym. Adv. Technol.* 18 (2007) 97.

**PREDNÁŠKY
CENA SHIMADZU 2011**

**ANALYTICAL POTENTIAL OF
PREPARATIVE ISOTACHOPHORESIS IN
COLUMN - COUPLING CONFIGURATION
WITH MASS SPECTROMETRY IN
ANALYSIS OF PROTEINS**

Monika Kondeková, Andrea Staňová, Jozef Marák, Dušan Kaniansky

Department of Analytical Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Mlynská Dolina CH-2, SK-842 15 Bratislava, Slovak Republic-mail:kondeкова@fns.uniba.sk

The analysis of proteins present in body fluids requires efficient sample preparation. Preparative capillary isotachopheresis (pITP) was proved to be a powerful sample pretreatment technique. One of these, based on a fractionation microvalve technique, was introduced for an off-line coupling of pITP with MS. Here, pITP, a sample pretreatment technology, includes: (1) pITP as using a column-coupling technique, (2) concentration(s) of the analyte(s) and simultaneously as removing the matrix constituents, (3) using a preparative valve as trapping for the ITP sample constituents. These key steps offer, for example, a very suitable analytical tool for some trace analytes and highly complex biological samples.

This work has studied potentialities of p(ITP-ITP)/MS in analysis of proteins at various concentration levels. In our detailed experiments following modes were covered: a direct injection in a MS mode and, subsequently, for LC/MS and p(ITP-ITP)/MS. In addition, for p(ITP-ITP)/MS discrete spacers in the p(ITP-ITP) stage of the combination were used, especially, to minimize very significantly for the biological matrices.

MS and MS/MS spectra, obtained from the reconstituted sample fractions, proved both the p(ITP-ITP) clean-up effect and ITP concentrating power for very low concentration levels of the analyte as present in very complex biological matrices.

This work was supported by a grant from the Slovak Research and Development Agency (No.VVCE-0070-

07) and the grants of Slovak Grant Agency, No`s.1/0882/09 and 1/0546/10.

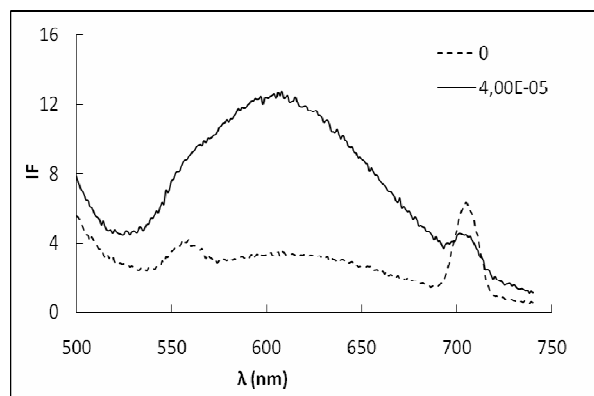
**STUDIUM INTERAKCE SANGUILUTINU
S DNA POMOCÍ FLUORESCENČNÍ
SPEKTROSKOPIE**

Stanislava Rybáková¹, Jana Urbanová¹, Petr Táborský¹

¹Ústav chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova Univerzita, Kotlářská 2, Brno, 611 37, stanislava.r@centrum.cz

Fluorescenční spektroskopie patří mezi nejcitlivější analytické metody s detekcí látek o koncentraci kolem 1×10^{-12} mol.l⁻¹ [1]. Stanovované látky však musí mít výjimečné luminiscenční vlastnosti (silná absorpce, vysoký kvantový výtěžek, excitační maximum látky blízké vlnové délce budícího zdroje, atd.). V bioanalytické chemii je metoda omezena slabou nebo nulovou fotofluorescencí biomolekul. Možnost, jak obejít nepřítomnost fluoroforů v bioanalytech, nabízí derivatizace fluorescenčním činidlem - navázání fluorescenční značky (kovalentní reakce) nebo sondy (nekovalentní interakce) za vzniku fluoreskujícího komplexu. Při stanovení DNA se nejčastěji používají fluorescenční sondy, kladně nabitě molekuly planární struktury, jejichž fluorescence závisí na okolním prostředí, které se „interkalují“ mezi jednotlivé báze dvoušroubovice. Tato specifika splňuje i benzo[c]fenantridinový alkaloid sanguilutin [2,3].

Byla studována interakce různých struktur DNA (dvoušroubovicová DNA s různou sekvencí bazí, vlásenková, jednořetězová DNA) se sanguilutinem. Bylo zjištěno, že sanguilutin se nespecificky váže na všechny zkoumané struktury dvoušroubovicové DNA, což dokazují velmi podobné konstanty stability těchto komplexů. Tato vlastnost je velmi výhodná pro kvantitativní stanovení dvoušroubovicové DNA. Emisní maxima komplexu sanguilutin-DNA se pohybují kolem 600 nm ($\lambda_{ex} = 470$ nm, pH= 6,2, I= 0,15 M). Limit detekce byl odhadnut na 0,1 ng.ml⁻¹ DNA. S ohledem na nízkou hodnotu limitu detekce je tedy možné budoucí využití sanguilutinu jako sondy pro stanovení DNA.



Obr 1: Závislosť intenzity fluorescence na vlnovej dĺžke pro komplex sanguilutin-DNA ($c_{SL} = 3 \cdot 10^{-6} \text{ mol.l}^{-1}$, pro $c_{DNA \text{ GC12}} = 4 \cdot 10^{-5} \text{ mol.l}^{-1}$ a $c_{DNA \text{ GC12}} = 0 \text{ mol.l}^{-1}$).

Práce vznikla za podpory grantů GAČR 525/08/0819 a LC06035 BIO-ANAL-MED

- [1] Vrábek P., Táborský P., Ryvolová M., Havel J., Preisler J.: *J. Lumin.* 283,118 (2006).
 [2] Urbanová J., Lubal P., Slaninová I., Táborská E., Táborský P.: *Anal. Bioanal. Chem.* 997, 394 (2009).
 [3] Slaninová Iva, Slanina Jiří, Táborská Eva: *Chem. listy* 102, 427 (2008)

VYUŽITIE ELEKTROFORETICKÝCH ČIPOV V ANALÝZE ENVIROMENTÁLNYCH A BIOLOGICKÝCH VZORIEK

Michal Horčíciak¹, Marián Masár¹, Peter Troška¹

¹ Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra Analytickej chémie, Mlynská Dolina CH-2, SK-84215 Bratislava, Slovenská republika, e-mail: michal.horciciak@fns.uniba.sk

Cieľom práce bolo ukázať možnosti využitia polymetylmakrylátového (PMMA) čipu so spájanými separačnými kanálkami (CC) v separáciách rôznych biomarkerov a polutantov v biovzorkách resp. enviromentálnych matriciach kapilárnou zónovou elektroforézou (CZE), resp. izotachoforézou kombinovanou on-line s CZE (ITP-CZE). CE separácie boli uskutočňované v hydrodynamicky uzatvorenom separačnom systéme s potlačeným elektroosmotickým tokom.

Glyfozát, jeden z najviac aplikovaných pesticídov v poľnohospodárstve, bol analyzovaný on-line kombináciou ITP-CZE uskutočnenej na CC čipe so zvýšenou dávkovacou kapacitou a vodivostnou detekciou v pitných vodách. ITP realizovaná v prvom separačnom kanáliku bola použitá ako koncentračná a dávkovacia technika pre rýchle CZE rozlíšenie a detekciu glyfozátu v druhom

separačnom kanáliku. Stanovené stopové koncentrácie glyfozátu (cLOD cca. 2,7 µg/l) v komplexnej enviromentálnej matrici boli na cca. 100 násobne nižšej úrovni ako predpisuje norma US EPA.

Dusičnany a dusitaný, oxidačné produkty oxidu dusnatého, sú biomarkermi rôznych neurologických ochorení [1]. CZE a CZE-CZE na CC čipe s vodivostnou detekciou umožnili rýchle (celkový čas analýzy cca. 20 min.) a reprodukovateľné (RSD migračných časov cca. 2 %, RSD plôch píkov cca. 7 %) stanovenia dusičnanov a dusitanov v reálnych vzorkách CSF. Prezentované metódy stanovenia rôznych polutantov a biomarkerov v komplexných enviromentálnych a biologických vzorkách ukázali potenciál využitia elektroforetického čipu pri riešení zložitých analytických problémov.

Túto prácu bola podporená grantovými agentúrami VEGA (1/0672/09) a APVV (VVCE-0070-07).

- [1] Z. Kupková, R., L. Beneš.: *Chem. Listy* 98 (2004) 116.

DEVELOPMENT AND APPLICATION OF CRYSTALLIC SILVER AMALGAM WORKING ELECTRODES IN VOLTAMMETRY AND AMPEROMETRY

Aleš Daňhel, Jana Tvrđíková, Jiří Barek

UNESCO Laboratory of Environmental Electrochemistry, Department of Analytical Chemistry, Faculty of Science, Charles University in Prague, Hlavova 8, 12843 Prague 2, Czech Republic, danhel@natur.cuni.cz

Novel electrode material – crystalline silver amalgam applicable for electrochemical detection of reducible organic nitro compounds is presented. Conditions for crystal growth were found and its crystalline surface was observed by Atom Forced Microscopy in Tapping mode. Electrochemical behavior of designed quasi-cylindrical single crystal silver amalgam electrode (CAgAE) was observed and compared with hanging mercury drop electrode and meniscus modified silver solid amalgam electrode. A 4-nitrophenol and 1,3-, 1,5- and 1,8-dinitronaphthalene (DNNs) were used as model compounds to confirm CAgAE's applicability for voltammetric batch measurements in aqueous and aqueous-methanolic media, respectively. All tested compounds were determined using differential pulse voltammetry at CAgAE with limits of detection at micromolar levels. The crystalline silver amalgam was also used for construction of cylindrical flow through cell which was further utilized for determination of DNNs mixture using HPLC with amperometric detection. The mechanical stability, small proportions,

low passivation effect and high signal to noise ratio are main advantages of this alternative electrode material expecting new application possibilities in electroanalysis.

Financial support from Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (projects LC 06035, MSM 0021620857 and RP 14/63), Grant Agency of Charles University (project 89710/2011/B-Ch/PrF) and project SVV 2011-263204 is gratefully acknowledged.

VYUŽITÍ MODERNÍCH EXTRAKČNÍCH METOD PŘI ANALÝZE BEZDÝMNÝCH PRACHŮ

Ondřej Fryš¹, Aleš Eisner¹, Petra BajEROVÁ¹
a Karel Ventura¹

¹Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Katedra analytické chemie, Studentská 573, 53210 Pardubice, ondrej@frys@email.cz

Analýza výbušnin, převážně bezdýmných prachů (BP) a trhavinových směsí je nedílnou součástí výrobního procesu dané trhaviny, třaskaviny nebo střeliviny. Dnes jsou pro tyto účely využívány hlavně chromatografické metody, především vysokoúčinná kapalinová chromatografie s ultrafialovou detekcí (HPLC/UV) [1]. Společným znakem všech metod analýzy výbušnin je nutnost úpravy vzorku před analýzou. K tomuto účelu jsou s výhodou používány různé způsoby extrakce v závislosti na povaze vzorku a matrici. Konvenční metodou pro úpravu vzorků BP a trhavin je Soxhletova extrakce dichlormethanem nebo diethyletherem [2].

Těžiště této práce spočívá na dvou základních pilířích. Na jedné straně nahradit Soxhletovu extrakci některými moderními způsoby extrakce a na druhé straně vytvořit metodu pro analýzu širokého spektra látek používaných jako složek BP pomocí kombinace plynové chromatografie s hmotnostní spektrometrií (GC/MS). Použitím vysokotlaké extrakce rozpouštědlem (PFE) nebo extrakce ultrazvukovou sondou (UE) je možné výrazně zkrátit dobu extrakce, která je u Soxhletovy extrakce 8 hodin, a dosáhnout stejné nebo vyšší extrakční účinnosti u stávajících a také nově používaných složek BP. Kombinace GC/MS umožňuje dosáhnout vysoké citlivosti a selektivity stanovení a možnosti analýzy látek, které neposkytují odezvu v ultrafialové oblasti světla při použití HPLC/UV. Nezanedbatelnou výhodou metody GC/MS je kvalitativní analýza neznámých vzorků výbušnin porovnáním hmotnostních spekter látek se spektry knihovními.

Tato práce vznikla za podpory výzkumného záměru MSM 0021627502 a grantu MPO ČR (ev. č. FR-TII/131).

[1] Ondřej Fryš, Petra BajEROVÁ, Aleš Eisner, Karel Ventura: CEJEM 7(3) (2009) 115-129.
[2] ČSN 66 8102 (část 23).

ZOBRAZOVACÍ HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIE KUTIKULÁRNÍCH LIPIDŮ OCTOMILKY OBEČNÉ

Filip Kaftan^{1,2}, Vladimír Vrkošlav², Josef Cvačka^{2*} a Aleš Svatoš³

¹Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, Albertov 6, 128 43, Praha 2, Česká republika

²Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i., Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha 6, Česká republika (cvačka@uochb.cas.cz)

³Max Planck Institut für chemische Ökologie, Skupina hmotnostní spektrometrie, Beutenberg, Hans-Knöll-Strasse 8, D-07745 Jena, Německo

Kutikulární lipidy zastávají u hmyzu celou řadu funkcí. Významnou roli, kromě funkce ochranné, představuje chemická komunikace, která komplexně ovlivňuje sociální chování jedince [1, 2].

Prostřednictvím MALDI-TOF hmotnostní spektrometrie a rastrovací elektronové mikroskopie byla studována a zobrazena prostorová distribuce kutikulárních lipidů na povrchu (hlavy, hrudi, zadečku a křídlech) octomilky obecné (*Drosophila melanogaster*). Sledovány byly zejména samičí feromony ((Z,Z)-7,11-heptakosadien a (Z,Z)-7,11-nonakosadien) a jejich poměrné zastoupení na jednotlivých částech těla much. Dále byla pozornost věnována přenosu samčího anti-atraktantu (Z)-oktadec-11-enyl acetátu, který samec po úspěšné kopulaci nanáší na samičí abdomen. Kromě toho byla také studována distribuce triacylglycerolů a dalších lipidů.

Jednotlivé experimenty byly provedeny jak v režimu LDI-TOF, tak MALDI-TOF s využitím hmotnostního spektrometru MALDI micro MX (Waters, USA). V případě MALDI-TOF byla jako matrice použita lithná sůl kyseliny 2,5-dihydroxybenzoové, která byla na vzorky sprejována pomocí rozprašovací pistole. Pro úspěšné MALDI zobrazování 3-D biologického objektu byla navržena speciální kovová MALDI deska s profilovanými jamkami zajišťující správnou výškovou fixaci a prostorovou orientaci samců i samic octomilky na desce.

Tato práce vznikla za podpory výzkumného záměru Z4 055 0506 a grantů GA ČR č. P206/10/P018 a 203/09/0139.

- [1] Ferveur, J.F.: *Behav. Genet.* 35, 279 (2005).
 [2] Yew, J.Y., Dreisewerd, K., Luftmann, H., Müthing, J., Pohlentz, G., Kravitz, E.A.: *Curr. Biol.* 19, 1245 (2009).

SPOJENIE SEPARAČNÝCH TECHNÍK IZOTACHOFORÉZY A KAPILÁRNEJ ZÓNOVEJ ELEKTROFORÉZY S LASEROM INDUKOVANOU FLUORESCENČNOU DETEKCIOU PRE VYSOKOCITLIVÉ STANOVENIE CHINÍNU V KLINICKÝCH MATRICIACH

Juraj Piešťanský, Peter Mikuš, Katarína Maráková, Lucia Veizerová

Katedra farmaceutickej analýzy a nukleárnej farmácie, Farmaceutická fakulta, Univerzita Komenského, Odbojárov 10, 832 32 Bratislava, piestansky@fpharm.uniba.sk

Predkladaná práca prezentuje možnosti elektroforetických separačných techník spájania kolón (CE-CE) s on-line laserom indukovanou fluorescenčnou detekciou (LIF) pre priame, selektívne a vysokocitlivé stanovenie chinínu v reálnych polykomponentných iónových matriciach (ľudský moč).

Kapilárna izotachoforéza (ITP) slúži ako ideálna injekčná technika v CE-CE. V tomto spojení ITP zabezpečuje efektívnu on-line predúpravu vzorky (prečistenie a prekoncentrácia), ktorá predchádza separácii kapilárnou zónovou elektroforézou (CZE). S ohľadom na ITP prekoncentráciu vzorky a citlivosť LIF detekcie je možné dosiahnuť koncentračné limity detekcie v pg/ml. Okrem tohto parametra môžu byť optimalizáciou ITP-CZE metódy dosiahnuté i iné separačné parametre (účinnosť, linearita, presnosť, výťažnosť, robustnosť) s vysokou presnosťou. Vysoká reprodukovateľnosť separácií bola dosiahnutá potlačením neselektívnych tokov (hydrodynamický, elektroosmotický) v navrhnutom hydrodynamicky uzatvorenom ITP-CZE systéme. To umožnilo vysoko spoľahlivú identifikáciu sledovaných píkav v LIF vs. CE elektroforeograme moču.

Úspešná validácia a aplikácia vypracovanej ITP-CZE-LIF metódy podnecuje jej rutinné použitie na vysokoúčinné a spoľahlivé analýzy chinínu v reálnych biologických vzorkách. Súčasne ITP-CZE-LIF prístup sa môže stať novým progresívnym nástrojom pre klinickú kontrolu

liečiv a liekov (metabolické, farmakokinetické a terapeutické štúdie).

Kľúčové slová: Izotachoforéza. Kapilárna zónová elektroforeza. Elektroforetické spájanie kolón. Laserom indukovaná fluorescenčná detekcia. Chinín. Moč. Biomedicínske analýzy.

Táto práca vznikla s podporou grantu Univerzity Komenského UK/25/2011 a grantov Farmaceutickej fakulty Univerzity Komenského FaF UK/4/2011, FaF UK/7/2011.

MONITORING NIEKTORÝCH NEUROLOGICKÝCH OCHORENÍ KAPILÁRNOU ELEKTROFORÉZOU NA ČIPE

Peter Troška¹, Marián Masár¹, Michal Horčičiak¹, Richard Chudoba², Dušan Kaniansky^{*1}

¹*Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra Analytickej chémie, Mlynská Dolina CH-2, 84215 Bratislava, Slovenská republika; troska@fns.uniba.sk*

²*Univerzita Karlova v Praze, Prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikální a makromolekulové chemie, Hlavova 8, 128 40 Praha 2, Česká republika*

Rôzne neurologické ochorenia, napr. kliešťová encefalitída, skleróza multiplex a Parkinsonova choroba, sa diagnostikujú na základe koncentračných zmien dusitanov a dusičnanov v mozgovomiechovom moku (CSF). Tieto anióny sú oxidačnými produktami neurotransmitera oxidu dusnatého (NO), ktorého samotná analýza je veľmi obtiažna [1]. Práca bola orientovaná na vývoj nových analytických metód na stanovenie stopových koncentrácií dusitanov a dusičnanov v CSF na báze elektroforetického čipu so spájanými kanálkami (CC). V prvom kanáliku boli analyty izotachoforeticky (ITP) zakoncentrované a následne v druhom kanáliku zónovo-elektroforeticky (CZE) rozlíšené a detekované integrovaným vodivostným detektorom. Polymetylmakrylátový (PMMA) čip pracoval v režime zvýšenej dávkovacej kapacity, keď objem dávkovanej vzorky (10 µl) bol približne rovnaký ako objem separačných kanálikov na čipe. Takéto usporiadanie umožnilo dosiahnuť nízke limity detekcie pre dusitany a dusičnany (0,2 µg/l, resp. 3 nmol/l). Interferujúce makrozložky (chloridy) prítomné v CSF boli eliminované v extrakčnom stupni (SPE) na báze Ag⁺ sorbentu. Obsahy dusitanov (0,4-1,2 µmol/l) a dusičnanov (14-50 µmol/l) v SPE-ITP-CZE analýzach vzoriek CSF sa pohybovali na bežných koncentračných úrovniach [2]. Prezentovaná

metóda stanovenia dusitanov a dusičnanov v CSF je plne aplikovateľná do klinických laboratórií.

Táto práca bola podporená grantovými agentúrami UK/47/2011, VEGA 1/0672/09 a VVCE 0070-07.

- [1] G. Ellis, I. Adatia, M. Yazdanpanah, S.K. Makela, *Clin. Biochem.* 31 (1998) 195.
 [2] G. Žunić, S. Spasić, Z. Jelić-Ivanović. *J. Chromatogr. B* 727 (1999) 73.

STUDIUM FLAVONOIDNÍCH GLYKOSIDŮ PO HYDROLÝZE METODOU HPLC-DAD-ELSD ZAMĚŘENÉ NA IDENTIFIKACI CUKERNÉ SLOŽKY

Věra Javorková¹, Jiří Pazourek¹

¹Farmaceutická fakulta VFU Brno, Palackého 1-3, 612 43 Brno, javorkova@email.cz

Při analýze glykosidů je potřeba pro určení struktury identifikovat aglykon i cukr, druh jejich vazby a polohu glykosidické vazby. Mezi nejčastěji používané metody patří HPLC-MS nebo GC-MS, které neumožňují rozlišení cukerných izomerů. Metody HPLC-NMR-MS či 2D NMR jsou instrumentálně a finančně náročné techniky [1]. Refraktometrický detektor je možné používat pouze v podmínkách izokratické eluce. ELSD je detektor vhodný pro analýzu sacharidů (citlivosti, stabilní základní linie, gradientové eluce) [2].

V této práci byla zkoumána kyselá a enzymatická hydrolyza flavonoidních glykosidů. Jako modelové vzorky byly zvoleny dvě řady glykosidů: deriváty kvercetinu a hesperetinu. Kyselá hydrolyza proběhla u všech standardů a bylo možno separovat a identifikovat aglykon i jednotlivé monosacharidy. Bylo prokázáno, že během hydrolyzy nedojde k destrukci monosacharidových jednotek (glc, gal, rha) ani aglykonu (kvercetin, hesperetin). Navíc byla zjištěna lineární závislost mezi koncentrací původního glykosidu a získanými koncentracemi uvolněných sacharidů. Enzymatická hydrolyza probíhá specificky. Glykosidy s cukernou složkou v poloze 3 nejsou enzymy rozkládány, což potvrzují i literární zdroje [3]. Dále byla metoda aplikována na glykosid izolovaný z *Polygonum lapathifolium* (Polygonaceae). Pomocí kyselé hydrolyzy byla látka určena jako kempferol-galaktosid. Protože nepodléhá enzymatické hydrolyze, lze předpokládat, že je cukerná složka navázána v poloze 3.

Kyselá hydrolyza je, co se týče finančních a časových nároků, levná a rychlá metoda. Enzymatická hydrolyza umožňuje získat

informace o pořadí a částečně i poloze navázaných sacharidů.

Práce vznikla s podporou grantu IGA VFU 10/2010/FaF.

- [1] Brito-Arias M., v knize: *Synthesis and Characterization of Glycosides*, kap. 7, s. 304. Springer, New York 2007.
 [2] Douša M., <http://www.hplc.cz/Teorie/ELSD.htm> (cit. 24.11.2010).
 [3] Day A.J., DuPont M.S., Ridley S., Rhodes M., Morgan M.R.A., Williwamson G.: *FEBS Letters* 436, 71 (1998).

CdS NANOPARTICLES ON MONTMORILLONITE AND THEIR PHOTOCATALYTIC PROPERTIES

Ondřej Kozák^{1,*}, Petr Praus¹, Kamila Kočí²

¹ Department of Analytical Chemistry and Material Testing, VŠB-Technical University of Ostrava, 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava-Poruba, Czech Republic, * ondrej.kozak@vsb.cz

² Department of Physical Chemistry and Theory of Technological Processes, VŠB-Technical University of Ostrava, 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava-Poruba, Czech Republic

Semiconductor metal sulphides are well known for their outstanding photocatalytic properties which were proved to be size-dependent [1]. The utilization of semiconductor nanoparticles for heterogeneous photocatalysis appears to be very promising method of CO₂ reduction because CO₂ can be reduced to utilizable compounds (e.g., methanol, ethanol, methane, hydrogen) by irradiating with UV light at room temperatures and low pressure [2,3].

The CdS nanoparticles were deposited on montmorillonite (MMT) in the presence of cetyltrimethylammonium (CTA). The transmission electron microscopy proved the formation of nanoparticles with the diameter of 7 nm. The band-gap energy was calculated at 2.63 eV using UV-VIS spectrometry results and Tauc plot.

The prepared CdS-MMT was used for the photocatalytic reduction of CO₂ providing considerably high efficiency which exceeded the results of commercial TiO₂ Degussa P25 4-8 times (depending on the compared product). The comparison of product amounts for both experiments is shown in Fig. 1. Hydrogen likely reduced CO₂ to CO and CH₄. The resistance of CdS to photocorrosion was determined by atomic absorption spectroscopy. It was found that less

than 4 % (mass) of CdS was decomposed during 24 hours of irradiation.

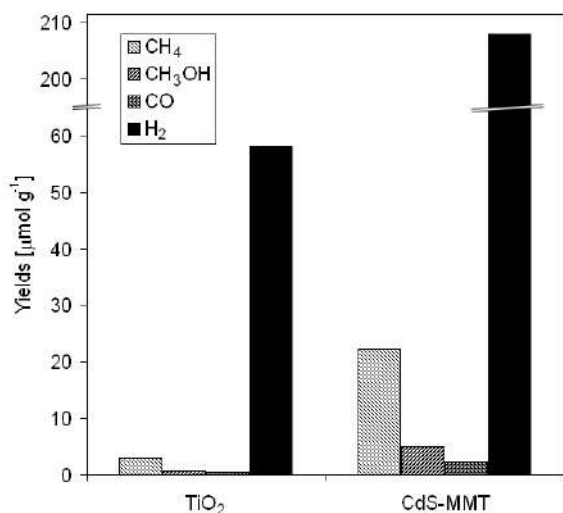


Fig. 1 The comparison of product yields per gram of the photocatalyst.

This work was supported by This work was supported by the Czech Science Foundation (project No. P107/11/1918) and by the Regional Materials Science and Technology Centre (CZ.1.05/2.1.00/01.0040) in Ostrava.

- [1] Henglein, A. Q-particles: Size quantization effects in colloidal semiconductors. *Progress in Colloid Polymer Science* 73 (1987) 1–4.
 [2] Yoneyama, H.: *Catalysis Today* 39 (1997) 169–175.
 [3] Kozák O., Praus P., Kočí K., Klementová M.: *Journal of Colloid and Interface Science* 352 (2010) 244–251.

POSTERY - SEKCIA 1 ANALYTICKÁ A FYZIKÁLNA CHÉMIA

1Po01

PHOTOINDUCED PROCESSES OF 2,1,3-BENZOSELENADIAZOLE, 2,1,3-BENZOTHIADIAZOLE AND THEIR NITRO AND AMINO DERIVATIVES

Zuzana Barbieriková¹, Maroš Bella², Viktor Milata², Andrej Staško¹, Dana Dvoranová¹, Vlasta Brezová¹

¹Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics

²Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry

Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava, Slovak Republic, vlasta.brezova@stuba.sk

The presence of selenium atom in organic molecules can provide new attractive properties, as some of the synthesized selenaheterocyclic compounds are applied in electronics, serve as precursors in organic synthesis, and have also demonstrated positive biological impact [1-3].

Electronic and FT-IR spectra of 2,1,3-benzoselenadiazole and 2,1,3-benzothiadiazole along with their nitro and amino derivatives were analyzed. The ability of investigated heterocyclic

compounds to generate paramagnetic intermediates upon monochromatic excitation ($\lambda=365$ nm) under different experimental conditions was monitored *via* EPR spin trapping technique. Photoinduced generation of superoxide radical anion upon irradiation of aerated dimethylsulfoxide solutions was confirmed using 5,5-dimethyl-1-pyrroline *N*-oxide (DMPO) spin trap. Continuous photoexcitation under argon resulted in EPR spectra of spin adducts assigned to carbon-centered radical intermediates as evidenced with DMPO, 5-ethoxycarbonyl-5-methyl-1-pyrroline *N*-oxide (EMPO), 5-(diisopropoxyphosphoryl)-5-methyl-1-pyrroline *N*-oxide (DIPPMPO) and nitrosodurene spin trapping agents (Fig. 1). However, upon the exposure of 4-amino-2,1,3-benzoselenadiazole and 4-amino-2,1,3-benzothiadiazole in the presence of DMPO and EMPO, spin adducts of nitrogen-centered radicals were also found. Steady-state photochemical experiments ($\lambda=365$ nm) with nitro-substituted 2,1,3-benzoselenadiazoles revealed a substantial influence of DMPO spin trap addition on the photoinduced reaction pathway.

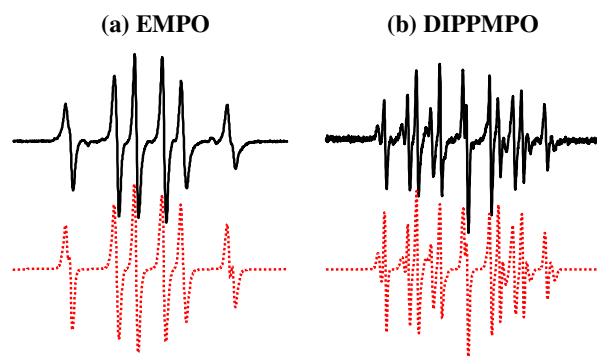


Fig. 1 Experimental (solid line) and simulated (dotted line) EPR spectra obtained after 10 minutes of photoexcitation of argon saturated dimethylsulfoxide solutions of 4-nitro-2,1,3-benzoselenadiazole in the presence of spin trapping agents: (a) EMPO (magnetic field sweep, SW = 8 mT); (b) DIPPMPPO (SW = 16 mT)

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-0339-10 and by Scientific Grant Agency of the Slovak Republic (VEGA Projects 1/0018/09 and 1/0660/11).

- [1] J. Młochowski, K. Kloc, R. Lisiak, P. Potaczek, H. Wojtowicz: *Arkivoc* 2007, 14 (2007).
 [2] T. Back: *Can. J. Chem.* 87, 1657 (2009).
 [3] M. Bella, M. Schultz, V. Milata, K. Koňariková, M. Breza: *Tetrahedron* 66, 8169 (2010).

1Po02 UV-VIS STUDY OF CAMPTOTHECIN

Miroslava Bobeničová, Stanislava Šoralová,
Dana Dvoranová, Martin Breza

*Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics,
Faculty of Chemical and Food Technology in
Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovak
Republic, miroslava.bobenicova@stuba.sk*

Camptothecin (CPT) and its derivatives are known for their antitumor activity. CPT interaction with enzyme Topoisomerase I leads to the formation of a ternary complex which prevents DNA replication. The details of this action are still fractionary and so the deeper study of spectroscopic features of CPT may be useful.

UV-Vis absorption spectra of CPT have been measured in various protic and aprotic solvents and their mixtures at room temperature. The solvent influence on the position and shape of absorption bands have been investigated and explained by quantum-chemical calculations. CPT monomer and dimer structures have been optimized at B3LYP/cc-pVDZ level of theory using the Integral Equation Formalism Polarizable Continuum Model of solvent effects.

Electron transitions have been evaluated using standard TD-DFT treatment. Our results indicate that experimental CPT spectra cannot be explained using its monomeric form only and the CPT dimers inclusion is necessary for this purpose.

This study was financially supported by Scientific Grant Agency of the Ministry of Education of the Slovak Republic VEGA (Projects no. 1/0018/09 and 1/0127/09) and Research and Development Agency of the Slovak Republic (contracts No. APVV 0339-10 and APVV 0202-10).

- [1] Brezová, V., Valko, M., Breza, M., Morris, H., Telser, J., Dvoranová, D., Kaiserová, K., Varečka, L., Mazúr, M., Leibfritz, D.: *J. Phys. Chem. B* 107 (2003) 2415.
 [2] Sanna, N., Chillemi, G., Gontrani, L., Grandi, A., Mancini, G., Castelli, S., Zagotto, G., Zazza, C., Barone, V., Desideri, A.: *J. Phys. Chem. B* 113 (2009) 5369.

1Po03 SEPARÁCIA A IZOLÁCIA ENZÝMU PREPARATÍVNOU KAPILÁRNOU IZOTACHOFORÉZOU

Róbert Bodor¹, Ivana Sedláčková¹, Helena Smelíková¹, Katarína Mikušová², Martina Beláňová²

¹*Katedra analytickej chémie, Prírodovedecká fakulta,
Univerzita Komenského v Bratislave, Mlynská dolina
CH2, 842 15 Bratislava, bodor@fns.uniba.sk*

²*Katedra biochémie, Prírodovedecká fakulta,
Univerzita Komenského v Bratislave, Mlynská dolina
CH2, 842 15 Bratislava*

Uridín difosfát- galaktopyranozylmutáza (UGM) je enzým, ktorý katalyzuje konverziu UDP-galaktopyranózy na UDP-galaktofuranózu, čo je prekursorom galaktofuranózy, súčasti bunkovej steny rôznych patogénnych mikrobov.

V tejto práci sme použili preparatívnu kapilárnu izotachoforézu (pÍTP) pracujúcu v anionickom režime na izolovanie enzýmu UDP-galaktopyranozylmutázy z bunkového extraktu nadprodukčného kmeňa *Escherichia coli*. Voľbou vyššej hodnoty pH použitých elektrolytov ako je izoelektrický bod enzýmu (pI=7,12) sme zabezpečili jeho anionickú formu.

Pri izolácii enzýmu sme použili dva prístupy, pričom v oboch sme využívali mikropreparatívny ventil s objemom 7 mikrolitrov na získavanie frakcií. Všetky frakcie boli kontrolované pomocou SDS-PAGE na prítomnosť makromolekúl.

Prídáním nízkomolekulových látok (diskrétnych spacerov-DS) do vzorky bunkového extraktu sme dosiahli oddelenie komponentov vzorky pomocou izotachoforetických zón DS. Vytvorili sa skupiny látok, ktoré boli ohraničené dobre definovanými ITP zónami. Izoláciou týchto skupín sme získali 7 frakcií. UDP-galaktopyranozylnutáza bola prítomná v dvoch frakciách, v jednej frakcii bez prítomnosti iných makromolekul na detekovateľnej úrovni metódy SDS-PAGE.

Pomocou CE analyzátoru s dvojkolónovým usporiadaním sme odstránili mimo separačný priestor všetky látky s vyššou efektívnou pohyblivosťou ako HEPES. V izolovanej frakcii, ktorá obsahovala látky migrujúce medzi HEPES a zakončujúcimi iónmi bola prítomná okrem UDP-galaktopyranozylnutázy ďalšia makromolekulová látka.

Bolo potvrdené zachovanie aktivity enzýmu vo frakciách získaných pITP, čo je kľúčové z hľadiska získavania čistého preparátu na iné ako analytické využitie.

Táto práca bola financovaná z projektov: VEGA 1/0882/09, VVCE 0070/07 a „26240120025 - Dobudovanie Centra excelentnosti metód a procesov zelenej chémie (CEGreenII)“, na základe podpory operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja.

1Po04

EUROPIUM(III)/AMERICIUM(III) EXTRACTION WITH NEW DERIVATIVES OF COBALT BIS(DICARBOLLIDE) B-SUBSTITUTED WITH HALOGEN AND DIPHENYL-N-TERT-OCTYL-CARBAMOYLMETHYLPHOSPHINE OXIDE

Mária Bubeníková¹, Pavel Selucký¹, Jiří Rais¹, Petr Švec², Bohumír Gruner²

¹Nuclear Research Institute plc., 250 68 Řež near Prague, Czech Republic, luc@ujv.cz

²Institute of Inorganic Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, v.v.i., 250 68 Řež near Prague, Czech Republic, gruner@iic.cas.cz

Reprocessing of spent nuclear fuel issued from nuclear power plants produces highly-active liquid waste. Separation of the most dangerous radionuclides, particularly minor actinides (^{241,243}Am, ²⁴⁵Cm, ²³⁷Np), reduces the amount and the long-term radiotoxicity of such waste before its final disposal. Several processes have been proposed for this purpose, e.g. TRUEX, TRPO,

DIDPA, TODGA, DIAMEX. Recently, we reported alternative separation procedure based on the use of cobalt bis(dicarbollide)(1⁻) covalently bonded with diphenyl-N-tert-octyl-carbamoylmethylphosphine oxide with a formula [(8-Ph₂P(O)-CH₂C(O)N-t-C₈H₁₇-(CH₂-CH₂O)₂-(1,2-C₂B₉H₁₀)(1',2'-C₂B₉H₁₁)-3,3'-Co)]⁻ (CMPO-COSAN) allowing separations of actinide/lanthanide groups from acidic waste solutions [1]. Because of advantages of the CMPO-COSAN, new halogenated derivatives of this agent with bromine and iodine atoms at the B(8') site of cobalt bis(dicarbollide)(1⁻) were developed with the aim to improve mainly the stability of the extractant. In this work, we evaluate the influence of the halogenation of CMPO-COSAN on the stability of compounds as well as on europium (americium) extraction efficiency which, as will be shown, significantly depends on the polarity of the used solvent.

Acknowledgements: We thank for partial financial supports from the Grant Agency of the Czech Republic (Project No. 104/09/0668), from Project LC-523 of the Ministry of Education, and from Research Plan AV0Z40320502 of AS CR.

[1] Pavel Selucký, Mária Lučaníková, Bohumír Gruner: Radiochim. Acta, (2011), submitted

1Po05

OMEZENÍ TRANSPORTNÍCH ZTRÁT PŘI STANOVENÍ KADMIA TECHNIKOU ELEKTROCHEMICKÉHO GENEROVÁNÍ JEHO TĚKAVÉ FORMY ZAVÁDĚNÉ DO KŘEMENNÉHO ATOMIZÁTORU AAS

Václav Červený¹, Darina Kováčová¹, Jakub Hraníček¹, Petr Rychlovský¹

¹Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, Hlavova 2030, 128 43 Praha 2, Česká republika, cerveny2@natur.cuni.cz

Kadmium bývá řazeno mezi tzv. kumulativní jedy a jeho toxicita bývá vysvětlována inhibicí sulfhydrolýzových enzymů a kompeticí s přechodnými kovy (Zn, Cu, Fe). Akutní (požitím) i chronická (inhalací par) otrava kadmíem má celou řadu specifických projevů. Cílem projektu bylo zjistit a omezit příčinu nízké citlivosti stanovení kadmia pomocí elektrochemického generování jeho těkavé formy, která byla detekována atomovým absorpčním spektrometrem.[1,2] Zvýšení účinnosti převodu Cd do plynné fáze pomocí přísadků různých činidel bylo zkoumáno v přechodí práci, kde se

ale potvrdilo, že dochádza k veľkým transportným ztrátam Cd ve vedení plynné fáze do atomizátoru.[2]

V rámci tohoto projektu byly tedy vytvořeny dva prototypy přímého spojení křemenného atomizátoru se separátorem plynné a akapalné fáze s nuceným odtahem. Jeden z nich měl navíc ještě přívod nosného plynu realizovaný prostřednictvím frity. Kromě toho byla zkoumána možnost vyhřívání transportního vedení a separátoru fází odporovým drátem. Díky tomu se podařilo s kontinuální detekcí Cd v křemenném atomizátoru snížit mez detekce stanovení kadmia na jednu třetinu původní hodnoty, tj. na $64 \mu\text{g}\cdot\text{l}^{-1}$. Tato hodnota je však stále výrazně (cca 10×) vyšší než při použití atomizace v grafitové kyvetě AAS.[2]

Tento projekt byl podpořen prostředky Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy, konkrétně výzkumného záměru MSM0021620857 rozvojového projektu RP 14/63. Dále byl podpořen Grantovou agenturou Univerzity Karlovy v Praze prostřednictvím projektu SVV 2011-263204. Autoři děkují za finanční podporu.

- [1] Lenka Bártová: Elektrochemické a chemické generování těkavé formy kadmia pro stopovou analýzu metodou QF- AAS, diplomová práce, Univerzita Karlova v Praze (2009)
- [2] Pavla Růžková: Zvýšení účinnosti elektrochemického generování těkavé formy kadmia pro stopovou analýzu metodou AAS, diplomová práce, Univerzita Karlova v Praze (2010)

1Po06

VPLYV ELEKTRICKÉHO PROTIPRÚDU NA ELEKTROFORETICKÚ SEPARÁCIU LÁTKOK PODOBNÝCH FYZIKÁLNO-CHEMICKÝCH VLASTNOSTÍ PRÍTOMNÝCH V KOMPLEXNÝCH ENVIRONMENTÁLNYCH A BIOLOGICKÝCH MATRICIACH

Ladislav Danč¹, Marián Masár¹

¹Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra Analytickej chémie, Mlynská dolina CH-2, 842 15 Bratislava, ladislav.danc@fns.uniba.sk

Stopová analýza mikrozložiek v prítomnosti (iónogénnych) makrozložiek veľmi blízkych fyzikálno-chemických vlastností nachádzajúcich sa zvyčajne v komplexných environmentálnych a biomedicínskych vzorkách je v súčasnosti jedným z najnáročnejších analytických problémov. Tieto problémy môžu byť len zčasti riešené pomocou vysoko-účinných separačných metód, pred ktoré sa zaraďujú vhodné úpravné techniky, prípadne spájaním separačných metód. V kapilárnej

elektroforéze (CE) je aplikácia elektrického protiprúdu jedným z potenciálne využiteľných prostriedkov na riešenie uvedeného problému. Tento príspevok sa zaoberá využitím elektrického protiprúdu [1] v CE na čipe so spájanými kanálkami (CC) a vodivostnou detekciou. Daný prístup umožňuje významne zlepšiť separačné a detekčné parametre mikroCE separačných systémov v oblasti stopovej analýzy látok blízkych fyzikálno-chemických vlastností. Ako potenciálne oblasti využitia navrhovaného prístupu budú ukázané stopové analýzy environmentálnych polutantov a rôznych metabolitov a biomarkerov. Optimalizované boli primárne CE separačné a pracovné parametre, rezistory a časové programy analýzy. Ako modelové analyty a matrice sa využívali rôzne environmentálne polutanty vo vodách a biomarkery v biologických matriciach. Tento prístup umožnil zlepšiť rozlíšenie kritických dvojíc - mikrozložka migrujúca v tesnej blízkosti makrozložky a znížiť detekčné limity pre stopové analyty v environmentálnych a biomedicínskych vzorkách bez ich zložitej predúpravy.

Táto práca bola podporená grantovými agentúrami UK/37/2011, VEGA 1/0672/09 a APVV VVCE-0070-07.

- [1] Dušan Kaniansky, Peter Havaši: Úrad pro vynálezy a objevy v Praze, č. 228436 (1986)

1Po07

CONSTRUCTION OF COULOMETRIC DETECTOR BASED ON GLASSY CARBON BEADS

Hana Dejmková¹, Jiri Barek¹, Jiri Zima¹

¹ Charles University in Prague, Faculty of Science, Department of Analytical Chemistry, UNESCO Laboratory of Environmental Electrochemistry, Albertov 6, CZ-12843 Prague 2, Czech Republic, dejmkova@natur.cuni.cz

Aromatic amines and phenolic compounds are, due to their frequent occurrence and importance, among frequently determined compounds. Their properties enable the utilization of electrochemical methods; however, they have a specific requirements regarding the electrodes, as the repeatability of the measurements is complicated by the formation of passivating polymer layers [1]. In case of coulometric detection, attempts have been made to prepare electrode with electroactive part prepared in-site and allowing the renewal of the electroactive part [2].

Construction of coulometric detector following these attempts is described. It is based on glassy carbon beads, filled in a capillary bed. Properties of the packing, such as optimum beads size and their amount, are optimized and parameters of the detector, such as conversion rate and peak shape, are tested using flow injection analysis with potassium ferrocyanide as the analyte. Selected conditions are then applied for the determination of aminonitrophenols after HPLC separation.

Financial support of the Czech Ministry of Education, Youth and Sports (projects MSM 0021620857, RP14/63 and LC06035), Technology Agency of the Czech Republic (project TA01020565), KONTAKT (AMVIS) project ME10004, and of the grant SVV-2011-263204 is gratefully acknowledged.

- [1] Henrig Lund, Ole Hammerich: Organic Electrochemistry. 4th ed.; Marcel Dekker: New York, 2001.
[2] Michael Mayer, Jaromir Ruzicka: Anal. Chem. 68 (1996) 3808-3814.

1Po08

VOLTAMETRICKÉ STANOVENÍ 2-AMINO-6-NITROBENZOTHAZOLU NA BISMUTOVÉ FILMOVÉ ELEKTRODĚ

Dana Deýlová¹, Anastasio Economou², Jiří Barek¹

¹ Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Albertov 6, 128 43 Praha 2, Česká republika, d.deylova@natur.cuni.cz

² National and Kapodistrian University of Athens, Department of Chemistry, Laboratory of Analytical Chemistry, Panepistimiopolis, Zografou, 157 71 Athens, Greece

2-Amino-6-nitrobenzothiazol (ANBT) je nejčastěji používán jako základ pro výrobu průmyslových barviv pomocí diazotace. Nejčastější barvy takto připravených látek jsou červená a fialová. Tato látka byla také v minulosti studována pomocí polarografických (oscilopolarografie), voltametrických a coulometrických metod na rtuťových elektrodách [1].

Vzhledem k všeobecným obavám z toxicity rtuti byla hledána jiná, méně toxická alternativa k těmto elektrodám. Za tímto účelem byla použita pro další studium této látky nově připravená bismutová filmová elektroda (Bi-AgSAE) [2], jejíž podklad tvořila leštěná stříbrná pevná amalgamová elektroda [3]. Takto připravená elektroda má řadu výhod oproti

klasické rtuťové elektrodě, jako jsou mechanická stabilita, robustnost a nižší toxicita.

V této práci byly optimalizovány podmínky pro přípravu bismutového filmu (opakovatelnost tvorby filmu, doba přípravy filmu) a pro stanovení ANBT. ANBT byl stanovován pomocí metod DC voltametrie (DCV) a diferenční pulzní voltametrie (DPV) v prostředí Brittonův-Robinsonův pufr o pH 10,0 – methanol (9:1). Jako optimální pro tato stanovení byl zvolen film, který byl vytvářen 300 s (na elektrodě o průměru disku 0,5 mm). Dosažené limity detekce ANBT byly na submikromolární úrovni jak pro modelové vzorky deionizované vody, tak pro modelové vzorky pitných vod, na nichž byly vyvinuté voltametrické metody stanovení ANBT úspěšně ověřeny.

Tato práce byla finančně podporována Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (projekty LC 06035, MSM 0021620857 a RP 14/63), projektem SVV 2011-263204 a projektem EU Lifelong Learning Programme (Erasmus).

- [1] Saraswati K., Vijayalakshmi K., Prameela P.: Transaction of the SAEST, 31, 96 (1996)
[2] Economou A.: TrAC, Trends Anal. Chem., 24, 334 (2005)
[3] Yosypchuk B., Barek J.: Crit. Rev. Anal. Chem., 39, 189 (2009)

1Po09

SORPTION OF NITRATE AND CUPRIC AND LEAD IONS ONTO LIGNITE HUMIC ACIDS

Leoš Doskočil¹, Soňa Konečná¹, Martina Klučáková¹

¹Institute of Physical and Applied Chemistry, Faculty of Chemistry, Brno University of Technology Purkyňova 118, 612 00, Brno, Czech Republic, xcdoskocil@fch.vutbr.cz

Humic acids (HAs) are qualitatively important component of soils. Due to their sorption properties, they can regulate amount of nutrients in the soil environment and their availability to plants and they can immobilize toxic contaminants such as heavy metals. Own sorption experiments were carried out for nitrates and cupric ions (Cu²⁺) in single component systems in aqueous solutions and for lead ions (Pb²⁺) in competition with copper bound to humic acids. As a sorbent, HAs were used from lignite mined in South Moravia, Czech Republic. In general, the lignite humic acids could be applied into soils to increase soil quality. Hence, they are

interesting for our sorption studies. All experiments were tested in batch conditions. Ion concentrations after sorption were determined by flow-through coulometry and UV-VIS spectrometry. Obtained adsorption dates were plotted by the Freundlich, Langmuir and modified Langmuir isotherm equations for the nitrates and Cu^{2+} and Pb^{2+} ions. Desorptions were performed for the nitrates and Cu^{2+} ions from HAs by water. Effect of pH and ionic strength on a sorption process was also studied.

1Po10
VÝVOJ CITLIVÉ A SELEKTIVNÍ
METODY PRO STANOVENÍ
PERFLUOROVANÝCH KYSELIN
VE VZORCÍCH ŘÍČNÍ VODY ČR POMOCÍ
PLYNOVÉ CHROMATOGRAFIE

Veronika Dufková¹, Radomír Čabala¹

¹Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, Hlavova 2030, 128 43 Praha, dufkova.k.v@volny.cz

Perfluorovaným organickým sloučeninám je v dnešní době věnována velká pozornost hlavně díky jejich potencionální toxicitě a výskytu v životním prostředí. Perfluorované kyseliny jsou perzistentní, bioakumulativní látky hojně využívané v průmyslu, např. při výrobě teflonu.

Proto byla vyvinuta jednoduchá, selektivní a citlivá metoda na stanovení těchto látek, konkrétně kyselin s délkou perfluorovaného řetězce $\text{C}_5 - \text{C}_{12}$. Bylo využito rychlé derivatizace, při které jsou převedeny perfluorované kyseliny na jejich těkavější isobutylestery účinkem chlormravenčanu isobutylatého [1]. Pro použití této metody pro reálné vzorky vod byla dále optimalizována metoda prekoncentrace a přečištění vzorků metodou SPE. Tak bylo dosaženo zakoncentrování analytů 400krát. Výtěžek extrakce se pohybuje mezi 60 – 100 % pro homologickou řadu osmi perfluorovaných kyselin v závislosti na délce jejich řetězce.

Na přístroji GC-NCI-MS byly určeny hodnoty LOD a LOQ, které se pohybují v rozmezí 0,05 – 9,7 ng mL⁻¹, respektive 0,2 – 32,2 ng mL⁻¹. Započítáme-li ještě prekoncentrační faktor 400, je možné touto metodou změřit koncentrace v řádech jednotek až desetin pg mL⁻¹, což nám zajišťuje dostatečnou citlivost pro měření reálných vzorků.

Metoda byla testována na vzorcích říční vody České republiky, konkrétně na vzorcích Vltavy a Labe. Ve všech měřených vzorcích byla nalezena

kyselina perfluoroktanová v koncentračním rozpětí 3,4 (<LOQ) až 27,6 pg mL⁻¹.

Autoři děkují projektům č. 40908 a SVV 261204 Grantové agentury UK, rozvojovému projektu MŠMT ČR (RP 14/63) a výzkumnému projektu (MSM0021620857) a projektu č. CZ0116 Norského finančního mechanismu za finanční podporu.

[1] Veronika Dufková, Radomír Čabala, Doubravka Maradová, Martin Štícha: J. Chromatogr. A, (2009)

1Po11
OPTIMALIZACE TLAKOVÉ EXTRAKCE
ROZPOUŠTĚDLEM PRO IZOLACI ADITIV
VYSOKOENERGETICKÝCH MATERIÁLŮ

Eisner Aleš, Peterová Jana, Ondřej Fryš, Bajerová Petra, Adam Martin, Karel Ventura

Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Katedra analytické chemie Studentská 573, 532 10 Pardubice, ales.eisner@upce.cz

Práce se zabývá analýzou vysokoenergetických materiálů, konkrétně bedýmých prachů. Pozornost je zaměřena na studium nového způsobu extrakce aditiv bedýmých prachů jako náhrady dnes používané extrakce pomocí soxhletova přístroje. Byla provedena optimalizace extrakční teploty, velikost navážky, doby extrakce, počtu extrakčních kroků a vhodného rozpouštědla. Získané extrakty po vhodném naředění byly analyzovány pomocí plynového chromatografu GC-17A s hmotnostním detektorem QP5050A (Shimadzu, Japonsko). K separaci byla použita kolona HP-5MS (30m, i.d. 0,25 μm stloušťkou filmu 0,25 μm). Nejvyšších extrakčních výsledků bylo dosaženo s extrahovadlem methanolem z navážky 1g při teplotě 100°C a dvou cklech trvajících 5minut. Doba extrakce byla oproti 8 hodinám při extrakci pomocí soxhletova přístroje zkrácena na 10 minut.

1Po12**VOLTAMMETRIC DETERMINATION OF ACETYLSALICYLIC ACID AND SALICYLIC ACID ON CARBON FILM ELECTRODE**

Abdul Rauf Khaskheli¹, Jan Fischer², Jiří Barek², Sirajuddin¹, Muhammad Iqbal Bhanger¹

¹National Centre of Excellence in Analytical Chemistry, University of Sindh, Jamshoro 76080, Pakistan

²Charles University in Prague, Faculty of Science, Department of Analytical Chemistry, UNESCO Laboratory of Environmental Electrochemistry, Hlavova 2030, 12843 Prague 2, Czech Republic, jan.fischer@natur.cuni.cz

Acetylsalicylic acid (ASA) and salicylic acid (SA) are one of the oldest medicines that play an important role in the modern therapeutics. ASA is rapidly hydrolyzed in the body to produce SA, the compound that is primarily responsible for the pharmacological activity of ASA. The chemical hydrolysis of electrochemically inactive ASA to electrochemically active SA can be used for voltammetric determination of both substances.

In this contribution, the carbon film electrode (CFE) was used as a working electrode for oxidation of SA. It was constructed by covering the surface of silver solid amalgam electrode (AgSAE) by the carbon film. Carbon film was prepared by immersing AgSAE's surface to carbon ink prepared by mixing carbon powder and polystyrene in dichloroethane [1].

Technique of differential pulse voltammetry on CFE for determination of these substance was used. The experimental parameters, such as pH of Britton-Robinson buffer, potentials for regeneration of electrode surface, and conditions for hydrolysis of ASA were optimized. Under optimized conditions in a linear calibration curves were obtained in the range from 0.2 to 100 $\mu\text{mol l}^{-1}$.

Contents of ASA and SA in several commercial pharmaceutical preparations and urine samples were determined using developed method.

Financial support from The Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (Projects LC 06035, RP 14/63 and MSM 0021620857), Project SVV 2011-263204 and from the Grant Agency of the Czech Republic (Project P206/10/P087) is gratefully acknowledged. A. R. K. thanks for the financial support of the Higher Education Commission of Pakistan.

[1] Bogdan Yosypchuk, Jiri Barek, Miroslav Fojta: *Electroanalysis* 18, 1126 (2006).

1Po13**NÁPLŇOVÉ KAPILÁRNÍ KOLONY PRO HPLC**

Martin Franc¹, Zuzana Bosáková¹, Pavel Coufal¹

¹Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, Albertov 2030, 128 43 Praha 2, Česká republika, martinfrancx@gmail.com

V analytické chemii existuje množství metod, kterými mohou být plněny chromatografické kapilární kolony. Pro kolony plněné částicemi se používají tři podobné metody, založené na principu filtrace. Stacionární fáze je tlačena do kolony plnicí fází za vysokého tlaku a v koloně je zadržena koncovou fritou. Plnicí fází může být plyn, superkritický oxid uhličitý nebo kapalina. Plnění pomocí kapaliny [1] je experimentálně nejjednodušší, přesto jsou výsledné kolony velmi kvalitní a dokonce je takto možno plnit i chromatografické čipy [2].

V dnešní době jsou velmi populární kolony monolitické. Jejich lože je tvořeno jediným blokem polymeru, který zcela vyplňuje vnitřek kapiláry. Vlastnosti monolitické stacionární fáze jsou dány složením polymerační směsi, proto je teoreticky možné monolitickou kolonu připravit přesně podle daných požadavků. Monolity je možné použít i jako koncové frity u jiných typů kapilárních kolon.

Mezi další, méně obvyklé, metody pro přípravu kapilárních kolon patří plnění gely, například stacionární fází Sephadex. Novou možnost představují supramolekulární polymery. Jedná se o látky, které vznikají reverzibilní polymerací molekul za vhodných podmínek [3]. Lze je připravit tak, aby obsahovaly v zásadě jakoukoli požadovanou funkční skupinu, a proto mají velký potenciál pro využití jako stacionární fáze.

Práce vznikla za podpory projektů 349511 a SVV 261204 Grantové agentury Univerzity Karlovy a také výzkumných záměrů MSM 0021620857 a RP14/63 Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky.

[1] Keller, H. P.; Erni, F.; Linder, H. R.; Frei, R. W.: *Anal. Chem.* **49** (1977), 1958.

[2] Yin H., Killeen K., Brennen R., Sobek D., Werlich M., van de Goor T.: *Anal. Chem.* **77** (2005), 527.

[3] Brunsveld, L., Folmer, B. J. B., Meijer, E. W., Sijbesma, R. P.: *Chem. Rev.* **101** (2001), 4071.

1Po14 VYUŽITÍ MODERNÍCH EXTRAKČNÍCH METOD PŘI ANALÝZE BEZDÝMNÝCH PRACHŮ

Ondřej Fryš¹, Aleš Eisner¹, Petra Bajarová¹
a Karel Ventura¹

¹Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-
technologická, Katedra analytické chemie, Studentská
573, 53210 Pardubice, ondrefry@email.cz

Analýza výbušin, převážně bezdýmných prachů (BP) a trhavinových směsí je nedílnou součástí výrobního procesu dané trhaviny, třaskaviny nebo střeliviny. Dnes jsou pro tyto účely využívány hlavně chromatografické metody, především vysokoúčinná kapalinová chromatografie s ultrafialovou detekcí (HPLC/UV) [1]. Společným znakem všech metod analýzy výbušin je nutnost úpravy vzorku před analýzou. K tomuto účelu jsou s výhodou používány různé způsoby extrakce v závislosti na povaze vzorku a matrici. Konvenční metodou pro úpravu vzorků BP a trhavin je Soxhletova extrakce dichlormethanem nebo diethyletherem [2].

Těžiště této práce spočívá na dvou základních pilířích. Na jedné straně nahradit Soxhletovu extrakci některými moderními způsoby extrakce a na druhé straně vytvořit metodu pro analýzu širokého spektra látek používaných jako složek BP pomocí kombinace plynové chromatografie s hmotnostní spektrometrií (GC/MS). Použitím vysokotlaké extrakce rozpouštědlem (PFE) nebo extrakce ultrazvukovou sondou (UE) je možné výrazně zkrátit dobu extrakce, která je u Soxhletovy extrakce 8 hodin, a dosáhnout stejné nebo vyšší extrakční účinnosti u stávajících a také nově používaných složek BP. Kombinace GC/MS umožňuje dosáhnout vysoké citlivosti a selektivity stanovení a možnosti analýzy látek, které neposkytují odezvu v ultrafialové oblasti světla při použití HPLC/UV. Nezanedbatelnou výhodou metody GC/MS je kvalitativní analýza neznámých vzorků výbušin porovnáním hmotnostních spekter látek se spektry knihovnými.

Tato práce vznikla za podpory výzkumného záměru MSM 0021627502 a grantu MPO ČR (ev. č. FR-TII/131).

[1] Ondřej Fryš, Petra Bajarová, Aleš Eisner, Karel Ventura: CEJEM 7(3) (2009) 115-129.

[2] ČSN 66 8102 (část 23).

1Po15 ACRIDINE DERIVATIVES AS METAL- CHELATORS AND RADICAL- SCAVENGERS

Lukáš Gaľa^a, Ladislav Drajna^b, Ján Imrich^b,
Marián Valko^a

^aSlovak University of Technology in Bratislava,
Faculty of Chemical and Food Technology, Institute
of Physical Chemistry and Chemical Physics,
Department of Physical Chemistry, SK-81237
Bratislava, Slovakia

^bPavol Jozef Šafárik University in Košice, Faculty of
Science, Institute of Chemistry, Department of Organic
Chemistry, SK-04154 Košice, Slovakia

A series of new derivatives of acridine has been studied for radical-scavenging as well as metal-chelating properties. Radical scavenging properties have been studied using the ABTS and DPPH radical scavenging assays. Metal-chelating properties of acridine derivatives have been studied using EPR spectroscopy. The results are discussed in terms of possible applications of the studied compounds as prospective drugs for the treatment of neurodegenerative disorders.

Author Keywords: acridine, free radicals, metal chelation, EPR spectroscopy

1Po16 SELECTED RADIOSENSITIZERS STUDIED BY MEANS OF THE ELECTROCHEMICAL METHODS

Miroslav Gál¹, Viliam Kolivoška¹, Marta
Ambrová², Ján Híveš², Romana Sokolová¹

¹J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry of ASCR,
v.v.i., Dolejškova 3, 182 23 Prague 8, Czech Republic,
miroslav.gal@jh-inst.cas.cz

²Institute of Inorganic Chemistry, Technology and
Materials, Department of Inorganic Technology,
Faculty of Chemical and Food Technology, STU
Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovak
Republic

Radiosensitizers (RDSs) are drugs that make cancer cells more sensitive to radiation therapy. In the metabolic pathway they undergo one-electron reduction to form radical anions. Therefore, their theoretical and/or experimental study is of high interest. The transfer of the first electron in both aqueous and aprotic media was studied by means of cyclic voltammetry and electrochemical impedance spectroscopy. The heterogeneous rate constant k^0 for the redox couple $\text{RDS} - \text{NO}_2 + e^- \rightleftharpoons \text{RDS} - \text{NO}_2^{\cdot-}$ was calculated from both CV and EIS measurements.

The equivalent circuit was proposed and its parameters were evaluated using a non-linear least square fitting. The value of a so called E_7^1 potential that account for the energy necessary to transfer the first electron to an electroactive group at pH = 7 in aqueous medium to form a radical anion was also determined. To study the correlation between reduction potentials of RDSs and some physicochemical properties of selected RDSs, theoretical calculations of electron affinities based on the DFT method with B3LYP functional at the level of 6-311++G** basis set in vacuum were utilized. Very good correlation was found between electron affinities of radiosensitizers and their both reduction potentials and E_7^1 potentials.

This research was supported by the Grant Agency of the Czech Republic (203/09/P502), The Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (LC510) and the Slovak Grant Agency (VEGA 1/0579/10).

- [1] Miroslav Gál, Ján Híveš, Romana Sokolová, Magdaléna Hromadová, Viliam Kolivoška and Lubomír Pospíšil, Coll. Czechoslovak Chem. Commun. 74 (2009) 1571.
- [2] Miroslav Gál, Magdaléna Hromadová, Lubomír Pospíšil, Ján Híveš, Romana Sokolová, Viliam Kolivoška, Jana Bulíčková, Bioelectrochemistry 78 (2010) 118.
- [3] Miroslav Gál, Viliam Kolivoška, Marta Ambrová, Ján Híveš and Romana Sokolová, Collect. Czech. Chem. Commun., accepted (2011).

1Po17

ÚVOD DO NANOTECHNOLÓGIE: RASTROVACIA SONDOVÁ MIKROSKOPIA FYLOSILIKÁTU MUSKOVIT

Ján Goruška¹, Dušan Velič¹ Daniel Repovský¹

1Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie

Nanotechnológia je vedecký smer, ktorý sa zaoberá skúmaním hmoty na úrovni veľkosti nanometrov. Medzi dve techniky, ktoré nanotechnológia využíva, patria Skenovacia tunelová mikroskopia (Scanning Tunneling Microscopy - STM), ktorou sa merajú iba vodivé povrchy a Atómová silová mikroskopia (Atomic Force Microscopy - AFM), ktorú využívame na meranie hlavne nevodivých povrchov. To, že sú to významné techniky svedčí aj fakt, že za ich objav bola udelená jej objaviteľom Nobelova cena. Táto práca bola zameraná na

charakterizáciu triedy fylosilikátového minerálu zo skupiny slúď a to muskovitu. Skúmala sa topografia a drsnosť povrchu, ktorý je voľným okom viditeľný ako veľmi hladký. Preto sa overovalo, či aj v rozmeroch nanometrov vykazuje malú drsnosť. V rámci štruktúry sa ďalej skúmala morfológia zlomu a zmerala sa aj hrúbka schodu tejto vrstvy, ktorý som vytvoril odlúpením. Experiment nakoniec dokázal, že aj v rozmeroch nanometrov je povrch veľmi hladký. Drsnosť povrchu bola približne 0,15 nm a hrúbka vrstvy, ktorú som vytvoril odlúpením bola 285 nm.

1Po18

ŠTÚDIUM VPLYVU PERTURBANTOV NA NEKATALYZOVANÚ OSCILAČNÚ REAKCIU 1,4-CYKLOHEXÁNDIÓNU S BROMIČNANOM V KYSLOM PROSTREDÍ

Ol'ga Grančičová, Anna Olexová, Erik Szabo, Peter Ševčík

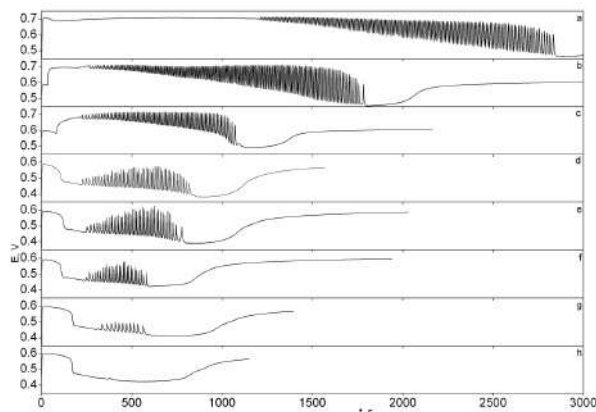
Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, anna.olexova@fns.uniba.sk, olga.grancicova@fns.uniba.sk

Reakcia 1,4-cyklohexandiónu (CHD) s bromičnanom sodným v prostredí H_2SO_4 je známa ako typická nekatalyzovaná oscilačná reakcia^{1,2}. Potvrdilo³ sa, že množstvo plynu uvoľneného pri reakcii je veľmi malé a v oscilačnej fáze takmer zanedbateľné. K novým informáciám o mechanizme môže prispieť štúdium vplyvu perturbantov, ktorých spoločným znakom je ich povrchová aktivita. V zmenách dynamiky sa prejavuje schopnosť perturbantov ovplyvňovať niektorú z čiastkových reakcií:

a/ v micelárnych roztokoch kationového (CTANO₃) a neiónových surfaktantov (Brij-30, Triton X-100), s výnimkou aniónového (SDS), dochádza k výraznej zmene oscilačných parametrov. Odráža sa v nich solubilizácia CHD a produktov bromácie v micely, inhibícia bromácie aromatického substrátu v dôsledku solubilizácie brómu a katalytický vplyv nabitého povrchu micely.

b/tetrabutylamónny ión má mimoriadne veľký vplyv na oscilačné parametre reakcie ako dôsledok tvorby hydrofóbných asociátov s Br⁻ a BrO₃⁻ príp. so semichinónovým radikálom – výrazne skracaie indukčnú periódu, mení smer počiatočného priebehu časovej závislosti redox potenciálu a znižuje počet oscilácií až do ich úplného vymiznutia.

c/ s rastúcou koncentráciou tert-butanolu sa predlžuje indukčná perióda, znižuje frekvencia oscilácií, znižuje počet oscilácií až do ich náhleho vymiznutia. Vychytním Br radikálov sa potlačí krok, v ktorom vzniká organický substrát s funkciou katalyzátora v danom mechanizme.



Časová závislosť redox potenciálu miešaného (50 rpm) systému $0,05 \text{ mol dm}^{-3}$ CHD + $0,05 \text{ mol dm}^{-3}$ NaBrO₃ + $0,05 \text{ mol dm}^{-3}$ H₂SO₄ pre rôzne koncentrácie Bu₄NClO₄: a – 0, b – 0,005, c – 0,01, d – 0,0105, e – 0,013, f – 0,015, g – 0,016, h – 0,017 mol dm⁻³.

Táto práca vznikla za podpory grantu Vega MŠ SR č. 1/0039/09

- [1] Szalai I., Körös E., Györgyi L.: J. Phys. Chem. 103, 243 (1999).
- [2] Zhao Bei, Wang J.: J. Phys. Chem. A, 109, 3647 (2005).
- [3] Szabo E., Adamčíková L., Ševčík P.: J. Phys. Chem. A (v tlači).

1Po19

EXPERIMENTÁLNE A TEORETICKÉ ŠTÚDIUM INTERAKCIÍ DVOJMOCNÝCH IÓNOV V PROSTREDÍ VODA-ACETONITRIL

Soňa Halászová¹, Olga Vollárová¹, Ján Benko¹, Monika Jerigová^{1,2}, Ivan Černušák¹

¹Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina, 842 15, Bratislava, ona.halaszova@gmail.com
²Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava

V práci sa experimentálne študovala solvátácia dvojmocných kationov Ca²⁺, Sr²⁺, Ba²⁺ a Pd²⁺ v zmesnom prostredí voda – acetonitril prostredníctvom prenosových Gibbsových energií a hmotnostnej spektrometrie sekundárnych iónov (ToF - SIMS). Na doplnenie celkového obrazu

o interakcii dvojmocných kationov kovov alkalických zemín (Mg²⁺, Ca²⁺, Sr²⁺, Ba²⁺, Ra²⁺) a dvojmocného kationu ušľachtilého kovu, Pd²⁺, s acetonitrilom sa použili výpočtové ab initio metódy. Prenosové Gibbsove energie poskytli kľúč k získaniu informácie o stabilizácii príp. destabilizácii študovaných kationov v zmesnom prostredí voda – acetonitril, čo viedlo k detailnejšiemu preskúmaniu nadobudnutých poznatkov pomocou hmotnostnej spektrometrie sekundárnych iónov. Najlepšia solvátácia acetonitrilom z vybraných iónov sa ukázala pre ión Pd²⁺ s voľnými d-orbitálmi, podobne ako u Ag⁺, kde sa stabilizácia v acetonitrile prejavila na ΔG_i^0 a aj v SIMS spektrách¹. Interakčné energie komplexov Me²⁺... CH₃CN (Me²⁺ = Mg²⁺, Ca²⁺, Sr²⁺, Ba²⁺, Ra²⁺) sa vypočítali metódou spriahnutých klastrov, ktorá zahŕňa mono-, di- a tri-excitácie (CCSD(T)) v kombinácii s bázou ANO-RCC-VTZP a výpočty interakčných energií komplexu Me²⁺... CH₃CN (Me²⁺ = Pd²⁺) sa realizovali na úrovni CASPT2/ANO-RCC-TZVP. Hodnoty Gibbsovej energie ΔG_{298K}^0 získané z teoretických výpočtov väzbových energií korelujú s hodnotami experimentálne získaných prenosových Gibbsových energií študovaných dvojmocných iónov.

Táto publikácia bola vytvorená realizáciou projektu „meta-QUTE: Centrum excelentnosti kvantových technológií“, na základe podpory operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja a tiež grantu APVV-0491-07.

- [1] Černušák, I., Aranyosiová, M., Vollárová, O., Velič D., Kirdajová O., Benko J., Interaction of Monovalent Cations With Acetonitrile, Int J Quant Chem 109, 2365-2372, 2009

1Po20

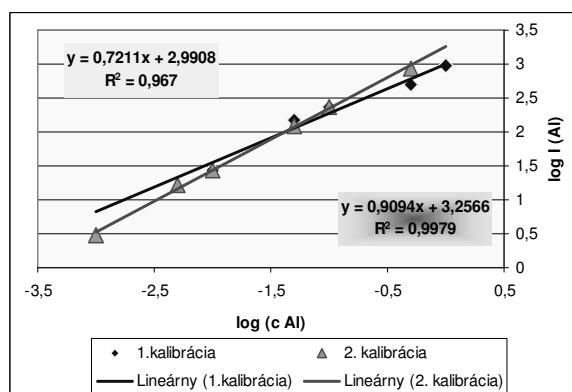
SPEKTROCHEMICKÉ SLEDOVANIE NEČISTÔT V KATALYZÁTOROCH

Ashraf Mustafa M. Abusenaina¹, Karol Flórián², Miroslava Hámbořská², Viera Vojteková¹

¹Katedra analytickej chémie, Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta UPJŠ v Košiciach, Moyzesova 11, 040 01 Košice; ²Katedra chémie Hutníckej fakulty Technickej univerzity v Košiciach, Letná 9, 042 00 Košice, Miroslava.Hamborska@tuke.sk

Spoločná funkcia katalyzátorov najrozmanitejšieho charakteru a účinku súvisí okrem iného aj od prítomnosti rôznych znečistení, ktoré môžu pochádzať jednak z jednotlivých fáz prípravy toho-ktorého katalyzátora, jednak môžu byť prítomné priamo

v aplikovanom nosiči. Preskúvanie takýchto typov anorganických znečistení (rôznych kovových prvkov) v katalyzátoroch na báze C + PdO sa realizovalo využitím priamej (bezrozkladovej) metódy atómovej emisnej spektrometrie ako typickej mnohoprvkovej metódy anorganickej analýzy. Na základe kvalitatívnej spektroskopickkej analýzy bola v niekoľkých typických vzorkách katalyzátorov na báze C + PdO dokázaná prítomnosť Al, Fe, Mg, Ni, Si a Ti. Pre uvedené prvky sa následne vypracovala kvantitatívna metóda opierajúca sa o synteticky pripravené kalibračné vzorky s matrix grafitovým práškom SU (Elektrokarbon-Topolča-ny) + 3 % PdO (Merck) a s odstupňovanými koncentraciami spektrálne čistých oxidov (Johnson-Matthey) uvedených prvkov. Kalibrácia sa v dvoch rozdielnych koncentračných rozsahoch uskutočnila metódou najmenších štvorcov dvakrát, typické priebehy kalibračných priamok pre Al uvádza obr. 1.



Obr. 1 Typické priebehy kalibračných priamok pre Al

Vypracovaná metóda umožnila sledovanie uvedených prvkov v koncentračnom rozpätí {0,5 – 0,005 %}, pričom hodnoty medzi dôkazu (3σ kritérium) sa pohybovali v rozmedzí 0,00005 % (Ni a Ti) až 0,0038 % (Fe).

Podakovanie: Grantovému projektu VEGA 1/0685/11. Táto práca bola podporovaná Ministerstvom školstva, vedy, výskumu a športu SR v zastúpení Agentúrou Ministerstva školstva, vedy, výskumu a športu SR pre štrukturálne fondy EÚ, projekt: „Hydrogenácie v kvapalnej fáze“, ITMS kód projektu 26220220144, Aktivita 2.1: Príprava a charakterizovanie nosičových katalyzátorov vhodných na hydrogenáciu v kvapalnej fáze, v rámci operačného programu Výskum a Vývoj.

1Po21

ELECTROCHEMICAL GENERATION OF VOLATILE FORM OF SILVER IN ATOMIC ABSORPTION SPECTROMETRY

Jakub Hraníček¹, Ondřej Linhart, Václav Červený, Petr Rychlovský

¹Charles University in Prague, Faculty of Science, Department of Analytical Chemistry, Hlavova 2030, CZ-12843 Prague 2, Czech Republic, hranicek@natur.cuni.cz

The electrochemical generation of typical hydride forming elements is nowadays sufficiently examined. The possibilities of electrochemical generation of volatile form of silver are investigated in this work. Experimental setup for electrochemical generation of silver with flow-through thin-layer electrolytic cell with ion-exchange membrane and lead wire as a cathode was used, coupled with atomic absorption spectrometry as a detection technique. The optimal catholyte was chosen 1 mol dm⁻³ HCl (another tested catholyte was H₂SO₄). The optimal value 60 ml min⁻¹ for carried gas (Ar) and 1.0 A for electric current were found. It was necessary to introduce the carrier gas into the catholyte flow before the entrance to the electrolytic cell. Under the optimal working parameters the limit of detection 0.14 µg ml⁻¹ was obtained for electrochemical generation in continuous mode. Hydrostatic gas liquid separator with sintered glass was used for characterization of volatile form. Simultaneously the chemical hydride generation in continuous mode was carried out. The limit of detection for chemical generation was 0.40 µg ml⁻¹. The same oxygen influence, as it was observed in the case of zinc volatile generation, was not observed.

The work was supported by the Project SVV 261204 and by the MSMT CR (research project: MSM0021620857 and 14/63).

1Po22

VOLTAMPÉROMETRICKÁ CHARAKTERIZÁCIA N-HETEROCYKLOV A ICH KOMPLEXOV

Miroslav Hunčák¹, Ladislav Rábara¹, Ján Mocák¹

¹Univerzita sv. Cyrila a Metoda, Fakulta prírodných vied, nám. J. Herdu 2, 917 01 Trnava, SK

Heterocyklické zlúčeniny nerozpustné vo vodných roztokoch, používané ako ligandy pre syntézu komplexov s prechodnými kovmi, sú študované metódou cyklickej voltampérometrie

v trojelektrodovom usporiadaní [1]. Použitými elektrodami boli nasýtená argenochloridová elektroda v kombinácii s platinovou tyčinkou, ako indikačné elektródy sa použili platinová disková elektroda, sklovitý uhlík a uhlíková pastová elektroda (CPE) s priemerom piesta 2 a 3 mm.

Uhlíková pasta bola pripravená homogenizáciou práškového uhlíka s parafínovým olejom [2] a bola testovaná na modelovom systéme $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-}/[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$ s použitím rôznych základných elektrolytov. Študované sú vplyvy zloženia a koncentrácie základného elektrolytu, rýchlosť skenu a hodnoty pH na prúdové odozvy. Porovnávali sa potenciálové okná dosiahnuté použitými indikačnými elektrodami v niekoľkých základných elektrolytoch anorganických solí a pufrův.

CPE bola ďalej modifikovaná pridaním študovanej zlúčeniny o množstve 5 – 10 % hm. do pôvodnej pasty. Cieľom bolo zistiť elektrochemické vlastnosti študovaného heterocyklického jadra, ktorá bola výrazne odlišná pri rôznych hodnotách pH.

Táto práca vznikla za podpory grantov VVCE-0004-07 a VEGA 1/1005/09.

[1] Čákrť a kol.: *Metódy a postupy elektrochemickej analýzy I*, Bratislava – Příbram, 2000

[2] Švancara I., Schlachl K.; *Chem. Listy* 93, 1999, 490 – 499

1Po23

FLUORESCENČNÁ SPEKTROSKOPIA SUPRAMOLEKULOVÉHO SYSTÉMU KUMARÍN/ β -CYKLODEXTRÍN/MICELA

E. Jáné¹, M. Žitňan¹, O. Grančičova¹, V. Szöcs¹, T. Pálszegi², I. Bugár², D. Lorenc², D. Velič^{1,2}

¹Prírodovedecká fakulta UK, Mlynská dolina, 84215 Bratislava

²Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava

Cieľom bolo skúmať solvatačnú dynamiku systému kumarín C522/ β -cyklodextrín/ reverzná micela. Motiváciou bolo sledovanie fluorescencie C522 v modifikovaných vodných prostrediach. Vlastnosti vody sa totiž významne menia, ak sa nachádza v objemoch na nanometrovej úrovni, alebo ak sa nachádza v blízkosti hydrofóbných povrchov. Doteraz bola skúmaná solvatačná dynamika kumarínu v cyklických oligoméroch¹, kumarínu reverzných micelách² a kumarínu lipidových dvojvrstiev³.

Zo statických fluorescenčných môžeme predpokladať, že C522 prenikla do n-heptánu, o čom svedčí emisné maximum pri 437 nm, časť však C522 interaguje s vodou o čom svedčí emisný peak pri 520 nm. Emisné maximum vo vode je 536 nm. Časovo rozlíšené fluorescenčné spektrá boli fitované dvojexponenciálnym poklesom, kde bol pozorovaný relaxačný čas na úrovni 10 ps a dlhý relaxačný čas na úrovni stoviek ps. Krátky relaxačný čas môžeme prisúdiť kumarínu vo vode. Dlhý relaxačný čas kumarínu v nepolárnom prostredí.

Táto práca bola finančne podporená grantami: APVV-0491-07, meta-QUTE a UK/310/2011.

[1] Y. Matsushita, T. Suzuki, T. Ichimura, T. Hikida: *J.Phys. Chem A* 108 (2004) 7490-7496

[2] D. Mandal, S. Sen, K. Bhattacharyya, T. Tahara: *Chemical Physics Letters* 359 (2002), 77-82

[3] P. Sen, T. Satoh, K. Bhattacharyya, K. Tominaga: *Chemical Physics Letters* 411 (2005), 339-344

1Po24

VÝPOČET OBSAHŮ MAJORITNÍCH ORGANICKÝCH SLOUČENIN Z CHEMICKÉ ELEMENTÁRNÍ ANALÝZY

Zdeněk Klika¹, Ivan Kolomazník¹

¹VŠB-Technická univerzita Ostrava, Třída 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava-Poruba, Česká republika, zdenek.klika@vsb.cz

Nedávno byla navržena a úspěšně odzkoušená nová obecná metoda pro kvantitativní stanovení minerálních fází (CQPAC) v uhlí a jiných heterofázových pevných vzorcích [1]. V tomto příspěvku je princip této metody aplikován na kvantitativní výpočet obsahu majoritních organických sloučenin přítomných ve vzorcích, u kterých je možno provést elementární analýzu a identifikovat veškeré přítomné organické sloučeniny. Pro tento přepočít jsou použity následující kroky:

- 1) stanovení elementární analýzy celého organického vzorku;
- 2) identifikace všech organických sloučenin ve vzorku a uvedení jejich sumárních chemických vzorců;
- 3) odhad obsahů minoritních organických sloučenin a jejich přepočít na obsah prvků v nich obsažených;
- 4) po výpočtu redukované chemické analýzy C, H, O, N, S, ... (odečtením výsledků z bodu 1 a 3) se provede výpočet obsahu majoritních organických sloučenin přítomných ve vzorku optimalizační metodou;

- 5) kontrolní zpětný výpočet elementární chemické analýzy z vypočtených obsahů majoritních a minoritních chemických sloučenin ve vzorku;
- 6) korekce obsahů minoritních organických sloučenin a nový výpočet podle bodů 4 a 5 s cílem získat minimální rozdíl mezi analyzovanými (bod 1) a vypočtenými (bod 5) prvky C, H, O, N, S,....

V tomto příspěvku je provedena ukázka výpočtu obsahu majoritních sloučenin v referentním vzorku a diskutovány možné chyby tohoto stanovení.

Tento výzkum je podporován z projektů GAČR (projekt No. 105/08/0913) a MŠMT ČR (projekt MSM 6198910016).

- [1] Zdeněk Klika, Michal Ritz: A new method for the determination of minerals in coal. Proceedings of International Conference of Coal Science and Technology, 2009, Cape Town, in: CD-ROM, section 8/08-2.

1Po25 SELF-ASSEMBLED MONOLAYERS OF METHYLATED BETA-CYCLODEXTRIN ON MERCURY AND GOLD ELECTRODES

Viliam Kolivoška¹, Miroslav Gál¹, Magdaléna Hromadová¹, Michal Valášek², Lubomír Pospíšil^{1,2}, Štěpánka Lachmanová¹, Jana Bulíčková¹, Christina Loukou³, Jean-Maurice Mallet³

¹ J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry of ASCR, v.v.i., Dolejškova 3, 18223 Prague, Czech Republic

² Institute of Organic Chemistry and Biochemistry of ASCR, v.v.i., Flemingovo n. 2, 16610 Prague, Czech Republic

³ UPMC-ENS-CNRS, Laboratoire de BioMolécules, UMR 7203, Fédération de Chimie Moléculaire FR 2769, Département de Chimie, Ecole Normale Supérieure, 24 rue Lhomond, 75005 Paris, France

Self-assembled monolayers of heptakis-(2,3,6-tri-O-methyl)- β -cyclodextrin derivatized with the acetylcystein moiety ($\text{Me}_3\beta\text{CD-SH}$) were investigated at the mercury|0.1 M KCl interface by the aid of ac polarography, cyclic voltammetry and ac voltammetry. At electrode potentials less negative than -1.50 V vs. 1 M LiCl|AgCl|Ag reference electrode, $\text{Me}_3\beta\text{CD-SH}$ molecules were found to form an adsorbed layer. The electrode capacitance does not depend on the bulk concentration of $\text{Me}_3\beta\text{CD-SH}$, suggesting the formation of a two-dimensional film. The adsorption of $\text{Me}_3\beta\text{CD-SH}$ was further

investigated on Au(111) surface by atomic force microscopy (AFM) and scanning tunnelling microscopy (STM). The techniques showed that the molecules form aggregates with the height and width 4.2 ± 0.7 nm when the adsorption takes place under the electrochemical control. On the other hand, the adsorption based on an ultrasonic treatment leads to well-organized layers, the thickness of which (1.1 ± 0.2 nm) is in a very good agreement with the diameter of the $\text{Me}_3\beta\text{CD-SH}$ molecule (1.2 nm).

- [1] V. Kolivoška, M. Gál, M. Hromadová, M. Valášek, L. Pospíšil: *J. Organometal. Chem.* **2011**, 696, 1404.

- [1] V. Kolivoška, M. Gál, Š. Lachmanová, P. Janda, R. Sokolová, M. Hromadová: *Coll. Czech. Chem. Commun.*, accepted 2011.

1Po26 ELEKTROKINETICKÝ POTENCIÁL NA POVRCHU PEVNÝCH LÁTEK

Zdeňka Kolská¹, Václav Švorčík², Nikola Slepíčková Kasálková², Alena Řezníčková², Zuzana Makajová²

¹Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita J. E. Purkyně v Ústí nad Labem, České Mládeže 8, 400 96 Ústí nad Labem, zdenka.kolska@ujep.cz, ²Ústav inženýrství pevných látek, Fakulta chemické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, vaclav.svorcik@vscht.cz

Ve většině heterogenních systémů tvořených pevnou látkou v kapalině nesou fázová rozhraní elektrický náboj. Ten může vznikat různými mechanismy [1] a má velký význam pro stabilitu systémů, pro jeho různé aplikace či případné modifikace. Ve styku s roztokem elektrolytu nabitý povrch přitahuje ionty opačného znaménka a vzniká útvar složený ze dvou vrstev opačně nabitých – elektrická dvojvrstva. Při pohybu roztoku elektrolytu po povrchu pevné látky se tato elektrická dvojvrstva rozdělí a na pohybovém rozhraní se vytvoří potenciálový rozdíl. Ten je charakterizován pomocí elektrokinetického potenciálu, tzv. zeta potenciálu [1]. Zeta potenciál je klíčovým parametrem ve výzkumu povrchů a inženýrství, poskytuje informace o chemii povrchu, jeho polaritě, smáčivosti, botnání. Je důležitým parametrem pro popis chemie povrchů pevných látek, jako např. celulózy, skla, kovů, textilií, keramiky, přírodních i umělých vláken, membrán, filtrů, polymerů a to jak nemodifikovaných, tak modifikovaných fyzikálními i chemickými procesy [2].

Díky unikátnímu zařízením pro stanovení zeta potenciálu rovinných vzorků zde prezentujeme elektrokinetický potenciál pro 21 vybraných polymerních folií. Ty byly vybrány tak, aby reprezentovaly polymery obsahující na povrchu „aktivní“ funkční skupiny i polymery bez těchto skupin, polymery polární i nepolární. Pro stanovení zeta potenciálu byly testovány 2 elektrolyty o 2 koncentracích.

Tato práce vzniká díky finanční podpoře následujících projektů: GAČR č. P108/10/1106 a GA AV ČR č. IAA 400720710.

- [1] Paul C. Hiemenz, Raj Rajagopalan, The Electrical Double Layer and Double-Layer Interactions. In: Principles of colloid and surface chemistry, Marcel Dekker, Inc., New York, 1997, p. 499
 [2] Václav Švorčík, Zdeňka Kolská, Thomas Luxbacher, Jan Mistrík, *Mater. Lett.*, 2010, **64**, 611.

1Po27

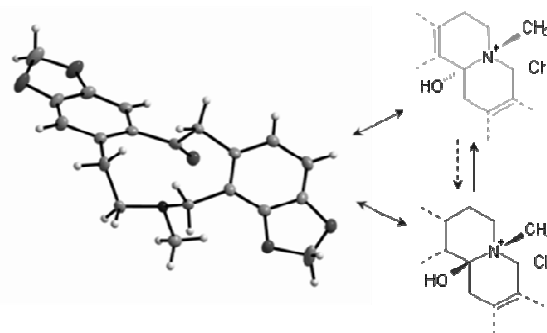
PROTOPIN A ALLOKRYPTOPIN: FLUORESCENČNÍ VLASTNOSTI A NMR ANALÝZA

Martin Kubala¹, Pavel Kosina², Jan Vacek², Igor Popa³, Marika Janovská¹, Jitka Ulrichová², Zdeněk Trávníček³, a Vilém Šimánek²

¹Katedra biofyziky, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, tř. 17. listopadu 12, 77 146 Olomouc, Česká republika, ²Ústav lékařské chemie a biochemie, Lékařská fakulta, Univerzita Palackého, Hněvotínská 3, 775 15 Olomouc, Česká republika, ³Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, tř. 17. listopadu 12, 77 146 Olomouc, Česká republika, kosina@unw.upol.cz

Isochinolinové alkaloidy protopin (PR) a allokryptopin (AL) byly nalezeny v řadě rostlin čeledi Berberidaceae, Papaveraceae, Fumariaceae a Rutaceae. Oba alkaloidy mají roli v obranných mechanismech rostlin. Vyvolávají řadu efektů u savců na buněčné úrovni i na úrovni celého organismu [1]. I když jsou studovány po dlouhou dobu, jejich fluorescenční vlastnosti ve vodném a nevodném prostředí nebyly dosud plně objasněny. V této práci jsme studovali pomocí metod časově rozlišené fluorescence a fluorescence v ustáleném stavu závislost struktury alkaloidů na pH. Pro potvrzení struktury tricyklické báze a *cis/trans* tetracyklických kationtů PR⁺ a AL⁺ bylo využito NMR a X-ray krystalografických metod (Obr. 1). Bylo zjištěno, že pro jednoznačnou identifikaci PR a AL je vhodná časově rozlišená fluorescence. Získané experimentální charakteristiky mohou být využity

ke studiu interakcí PR a AL s biomakromolekulami, např. DNA. Další informace včetně doplňujících dat, obrázků a schémat jsou uvedeny v práci [2].



Obr. 1 Struktura tricyklické báze protopinu (vlevo). *Trans* (horní) a *cis* (dolní) izomery PR⁺ a AL⁺, které jsou tvořeny v roztocích o pH ≤ 8,9 (znázorněn pouze kruh B).

Autoři děkují za finanční podporu grantovým projektům MSMT ČR (MSM 6198959215, 6198959216, a 6198959218), dále grantu GA ČR 301/10/0883.

- [1] Jan Vacek, Daniela Walterová, Eva Vrublová, Vilém Šimánek: *Heterocycles* (2010) 81, 1773-1789.
 [2] Martin Kubala, Jan Vacek, Igor Popa, Marika Janovská, Pavel Kosina, Jitka Ulrichová, Zdeněk Trávníček, Vilém Šimánek: *J. Lumin.* (2011) 131, 1340-1345.

1Po28

HPLC DETERMINATION OF CHOSEN FLAVONOIDS IN HOP EXTRACT

Jarmila Kováčová¹, Jozef Lehotay², Ján Mocák¹, Jozef Čižmárik³

¹Department of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, University of SS. Cyril and Methodius, Trnava, Slovak Republic, kovacova.jarka@gmail.com

²Institute of Analytical Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Bratislava, Slovak Republic

³Faculty of Pharmacy, Comenius University, Bratislava, Slovak Republic

For the determination of flavonol aglycones, a hydrolysis procedure is required to break the glycosidic bonds. Depending on the sugar unit, several parameters can influence the extraction recovery because the degradation reactions may occur or hydrolysis is incomplete. The major factors are the HCl concentration, the hydrolysis time, the temperature, and time of extraction. Quercetin was stable in pure water and methanol and, from this point of view, this flavonoid can be

determined only in the water or methanol extracts. When acidic solution was used for extraction, the formation of quercetin (by hydrolysis of rutin) and, simultaneously, its degradation were observed depending on the pH value and time of extraction. Therefore, the determination of quercetin and kaempferol in the hop samples was complicated because they can be present in two forms (free and bound in glycosides). Storage of samples was very important because flavonoids are antioxidants and, therefore, they are decomposed. The higher yield of extraction was accomplished by using methanol with hydrochloric acid. The concentration of quercetin was 165.3 ± 5.0 $\mu\text{g/g}$ of dry sample; the concentration of kaempferol was 125.9 ± 4.3 $\mu\text{g/g}$ of dry sample after 2 hr of extraction using 0.1 mol/L HCl in methanol solutions.

This work was supported by VEGA grants no. 1/1005/09, and 1/0164/11.

1Po29 **UHLÍKOVÉ NANORÚRKY AKO** **MODIFIKÁTOR TUHEJ UHLÍKOVEJ** **ELEKTRODY**

Zuzana Kováčová, Lubomír Pikna

*Technická univerzita v Košiciach, Letná 9, 042 00
Košice, zuzana.kovacova@tuke.sk*

Uhlíkové nanorúrky (CNT) sú predmetom výskumu v oblasti chémie, fyziky a materiálov vďaka ich štruktúre, mechanickým, elektronickým a chemickým vlastnostiam. Sú rozsiahlo využívané pri výrobe rôznych elektrochemických senzorov. V posledných rokoch výrazne vzrástol záujem o modifikáciu elektród uhlíkovými nanorúrkami, pretože takto modifikované elektródy majú lepšie elektrochemické vlastnosti a teda ponúkajú citlivejšie stanovenie najrôznejších látok ako ťažké kovy, biomolekuly. Boli vyvinuté rôzne metódy dizajnu a konštrukcie elektród [1]. Najjednoduchším spôsobom je nanosenie CNT ako suspenzie vo vhodnom spojive na povrch tuhej uhlíkovej elektródy [2]. Pri stanovení ortuti pomocou modifikovanej parafínom impregnovanej uhlíkovej elektródy boli píky oxidácie aj redukcie vyššie ako pri použití nemoifikovanej elektródy. Z kalibračných závislostí vyplýva, že modifikovaná elektróda sa vyznačuje oveľa väčšou citlivosťou ako nemoifikovaná.

Tento príspevok vzniká za podpory projektu VEGA 1/0236/11.

- [1] AHAMMAD, A.J.S. – LEE, J.-J. – RAHMAN, A., Electrochemical Sensors Based on Carbon Nanotubes. In *Sensors*, vol. 9, 2009, p. 2289-2319.
[2] AGŮÍ, L. – YÁÑEZ-SEDEÑO, P. – PINGARRÓN, J.M., Role of carbon nanotubes in electroanalytical chemistry. In *Analytica chimica acta* 622, 2008, p. 11-47.

1Po30 **KRITICKÉ POROVNÁNÍ KAPILÁRNÍ** **KAPALINOVÉ CHROMATOGRAFIE A** **KLASICKÉ VYSOKOÚČINNÉ** **KAPALINOVÉ CHROMATOGRAFIE VE** **SPOJENÍ S TANDEMOVOU HMOTNOSTNÍ** **DETEKCI PRO ANALÝZU** **ESTROGENNÍCH POLUTANTŮ VE** **VODNÉ MATRICI PO EXTRAKCI TUHOU** **FÁZÍ.**

Kozlík Petr¹, Bosáková Zuzana¹

¹*Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta,
Univerzita Karlova v Praze, Albertov 2030, 12843
Praha 2, Česká republika, kozlipet@centrum.cz*

Cílem této práce bylo vyvinout a porovnat metodu vhodnou ke stanovení estrogenních polutantů ve vodné matrici pomocí kapilární kapalinové chromatografie (cLC) a klasické vysokoúčinné kapalinové chromatografie (HPLC). U obou metod byl použit vysoce citlivý detektor Agilent 6460 Triple Quadrupole. Bylo optimalizováno složení mobilní fáze tak, aby došlo k separaci všech studovaných analytů (i těžko rozdělitelného izomerního páru $17\alpha/\beta$ -estradiolu) a zároveň k jejich dostatečné ionizaci. Separace u cLC byla prováděna na kapiláře Zorbax SB C18 (5 μm), u HPLC byly použity dvě kolony, a to SunFire C18 (5 μm) a Ascentis Express C8 (2,7 μm , fused-core), která představuje novou generaci stacionárních fází vyznačujících se rychlým přenosem hmoty. K ionizaci bylo využito elektrospreje (ESI) v pozitivním módu, u HPLC bylo použito k ionizaci kromě ESI také ESI s novou technologií Jet Stream (JT). Následně byla optimalizována extrakce tuhou fází (SPE). Nejlepších výsledků bylo dosaženo s kolonkou Discovery DSC-18Lt s monomerně vázaným oktadecylem na deaktivovaném silikagelu, na které bylo dosaženo výborných výtěžností sledovaných analytů (94 - 100 %; RSD < 8 %). Byly vyhodnoceny limity detekce a kvantifikace a metody byly vzájemně kriticky porovnány. Za

optimalizovaných podmínek byly analyzovány reálné vodné roztoky (Vltava).

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury Univerzity Karlovy projekt SVV 261204 a za podpory Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky v podobě výzkumného záměru MSM0021620857 a rozvoje programu RP 14/63

1Po31

A HANGING MERCURY DROP ELECTRODE-BASED VOLTAMMETRIC DNA BIOSENSOR FOR THE DETECTION OF DNA DAMAGE CAUSED BY NITRATED POLYCYCLIC AROMATIC HYDROCARBONS

Zuzana Krejčová, Vlastimil Vyskočil and Jiří Barek

Charles University in Prague, Faculty of Science, Department of Analytical Chemistry, UNESCO Laboratory of Environmental Electrochemistry, Hlavova 2030/8, 128 43 Prague 2, Czech Republic, krejco11@seznam.cz

Although the genotoxic effects of nitrated polycyclic aromatic hydrocarbons (NPAHs) are already well known more than 30 years, an electrochemical *in vitro* research on their interactions with DNA was realized quite recently [1]. In this contribution, a hanging mercury drop electrode was utilized as a signal transducer for calf thymus DNA, attached at the electrode surface by physisorption, to provide a sensitive voltammetric DNA biosensor. Thus prepared DNA biosensor was successfully applied for the detection of intercalation of selected model NPAH (2-nitrofluorene) between the DNA base pairs, causing damage to double-stranded DNA structure via formation of DNA–2-nitrofluorene complex.

Moreover, using such DNA biosensor, the oxidative DNA damage induced by reactive short-lived nitro anion radicals, generated during the electrochemical reductive activation of 2-nitrofluorene, can be voltammetrically detected. We suppose that 8-oxoguanine (one of the most common DNA lesions) is formed during this interaction that leads to guanine–cytosine base pair interruption and DNA double-strand breaks formation [1, 2].

It is expected for our future research to apply this voltammetric biorecognition model for the preparation of DNA biosensors based on non-toxic silver amalgam electrodes [3], which are

more suitable for centralized environmental screening of hazardous NPAHs.

Financial support of this work, provided by The Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (Projects MSM 0021620857, LC 06035 and RP 14/63) and by the Project SVV 2011-263204, is gratefully acknowledged.

- [1] V. Vyskočil, J. Labuda, J. Barek: *Anal. Bioanal. Chem.*, 397, 233-241 (2010).
- [2] F. C. Abreu, M. O. F. Goulart, A. M. Oliveira Brett: *Biosens. Bioelectron.*, 17, 913-919 (2002).
- [3] R. Fadrná, K. Cahová-Kucharíková, L. Havran, B. Yosypchuk, M. Fojta: *Electroanalysis*, 17, 452-459 (2005).

1Po32

SEKVENČNÉ STANOVENIE ANIÓNOV A KATIÓNOV V PITNÝCH VODÁCH KAPILÁRNOU ZÓNOVOU ELEKTROFORÉZOU NA ČIPOCH

Pavol Kruk¹, Milan Luc¹, Marián Masár¹

¹Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra analytickej chémie, Mlynská dolina CH-2, 842 15 Bratislava, kruk@fns.uniba.sk

Príspevok je zameraný na využitie kapilárnej zónovej elektroforézy (CZE) na číloch s vodivostnou detekciou na stanovenie kationických (vápenaté, horečnaté, draselné, sodné a amónne katióny) a anionických (síran, chloridy a dusičnany) makrozložiek v pitných vodách. Sekvenčné stanovenia analytov boli uskutočňované za použitia rozdielnych elektrolytových systémov pre katióny a anióny. Limity detekcie boli stanovené na úrovni 100 µg/l pre anióny, pre katióny boli na úrovni 10 µg/l pri použití univerzálnej vodivostnej detekcie, keď objem dávkovanej vzorky bol 900 nL. Za preferovaných pracovných a separačných podmienok (potlačený elektroosmotický tok a hydrodynamicky uzatvorený separačný systém na CC čípe) bola dosiahnutá vysoká reprodukovateľnosť kvalitatívnych a kvantitatívnych parametrov pre študované analyty prítomné v modelových vzorkách. RSD hodnoty migračných časov boli do 1 %. RSD hodnoty plôch pík sa pohybovali v rozmedzí 0,7-3,8 %. Praktická aplikovateľnosť vyvinutých analytických metód bola ukázaná na vodovodnej a balenej pitnej vode. Vysoká reprodukovateľnosť CZE stanovení študovaných analytov (0,7-2,7 % RSD plôch pík pre anióny a 0,8-3,8 % RSD plôch pík pre katióny) a prakticky žiadna predúprava analyzovaných vzoriek (vhodné riedenie, príp. filtrácia) spolu

s krátkym celkovým časom sekvenčnej analýzy kationov a aniónov (do 15 min.) zaraďuje vypracované analytické metódy uskutočňované na čipe medzi veľmi silné analytické nástroje pre analýzu iónogénnych látok v (pitných) vodách.

Táto práca bola finančne podporená grantmi VEGA 1/0672/09 a VVCE-0070-07.

1Po33

STUDIUM KINETIKY β -N-ACETYLHEXOSAMINIDAS POMOCÍ KAPILÁRNÍ ELEKTROFORÉZY

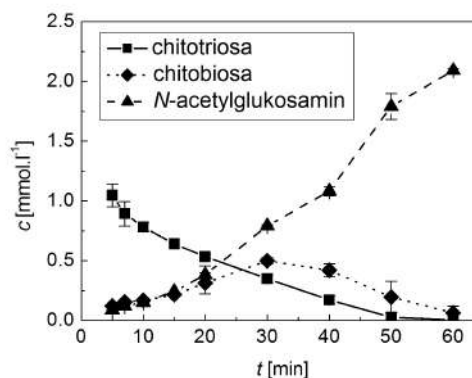
Tomáš Krížek¹, Pavel Coufal¹, Helena Ryšlavá², Veronika Doubnerová²

¹Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, Hlavova 8, 12843Praha krizek@natur.cuni.cz

²Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra biochemie, Hlavova 8, 12843Praha

Studie enzymové kinetiky jsou jedním z klíčových bodů základního i aplikovaného biochemického výzkumu. Současný trend směřuje od využití chromogenních substrátů a spektrometrických stanovení spíše k práci s reálnými substráty a produkty enzymů za použití separačních analytických metod. Kapilární elektroforéza si v této oblasti vydobyla pevné místo [1], především díky velmi nízké spotřebě vzorků a činidel, rychlosti analýzy a flexibilitě experimentálního uspořádání.

V rámci této práce byla optimalizována elektroforetická metoda pro současné stanovení chitotriosy, chitobiosy a *N*-acetylglukosaminu. Spolehlivost metody byla ověřena studii reprodukovatelnosti, robustnosti vůči pH vzorku a stanovením limitů detekce a kvantifikace. Metoda umožňuje separaci a kvantifikaci všech tří látek bez nutnosti předchozí derivatizace. Enzymová reakce se provádí přímo ve vzorkové vialce a ukončuje se dávkováním k analýze. Tím se minimalizuje riziko kontaminace nebo ztráty analytů při manipulaci se vzorkem. Vyvinutá metoda byla aplikována při monitorování koncentrací substrátu a produktů v průběhu štěpení chitotriosy β -*N*-acetylhexosaminidasou (obr. 1). Toto monitorování lze díky možnosti opakovaných nástřiků v průběhu analýzy provádět zcela automaticky. Dále jsou prezentovány výsledky měření aktivity enzymu na pH reakční směsi a vlivu koncentrace substrátu na rychlost reakce.



Obr. 1 Monitorování koncentrací substrátu (chitotriosy), meziprojektu (chitobiosy) a konečného produktu (*N*-acetylglukosamin) enzymového štěpení v průběhu reakce.

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury Univerzity Karlovy (projekty 710 a SVV261204) a Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR (projekty MSM0021620857a RP 14/63).

[1] Yi Fan, Gerhard K. E. Scriba: J. Pharm. Biomed. Anal. 53 (2010) 1076-1090

1Po34

NOVÁ METODA POST-KOLONOVÉ DERIVATIZACE AMINOKYSELIN POMOCÍ „SOLID-PHASE“ REAKTORU

Anna Kubičková¹, Pavel Coufal¹

¹Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, Albertov 6, 128 40 Praha 2, Česká republika, anna.kubickova@natur.cuni.cz

Analýza aminokyselin a peptidů patří mezi nejčastější chromatografická stanovení. V rámci předkládané práce byl vyvinut a otestován post-kolonový reaktor umožňující vysoce citlivé stanovení aminokyselin běžnou UV-VIS detekcí. Post-kolonová derivatizace tuhým derivatizačním činidlem nevyžaduje oproti derivatizaci v homogenní fázi žádné další přídavné pumpy a tedy nedochází ke zbytečnému zředění a rozmytí zón analytů, které by vedly ke snížení účinnosti separace. Další výhodou „solid-phase“ reaktoru je jeho stálost a dlouhá životnost.

Základ reaktoru tvoří patrona (předkolona) naplněná oxidem měďnatým, která je připojena na výstupní konec separační kolony. Při průchodu aminokyselin reaktorem dochází k tvorbě měďnatých komplexů, které narozdíl od volných aminokyselin vykazují intenzivní absorpční pás v oblasti kolem 230 nm. Tato metoda byla testována na 20 základních aminokyselinách. Ve

všech případech došlo ke zvýšení citlivosti detekce o jeden až tři řády a k výraznému snížení limitů detekce. Vzhledem k použití „solid-phase“ reaktoru nemá derivatizace negativní vliv na separační účinnost.

Námi navržená metoda přináší jednoduché a ekonomické řešení pro analýzu aminokyselin. Stejný princip pak může být využit i pro detekci široké škály jiných dusíkatých látek (např. polyaminů, aminokyselin, peptidů atd.), které jsou schopné tvořit dostatečně stabilní komplexy s Cu^{2+} ionty.

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury Univerzity Karlovy (projekt SVV261204) a Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR (projekty MSM0021620857a RP 14/63).

1Po35 ELEKTROCHEMICKÉ STUDIUM KATALYTICKÝCH VLASTNOSTÍ SYNTETICKÝCH METALOPROTEINŮ

Štěpánka Lachmanová^{1,2}, Magdaléna Hromadová¹

¹Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i. Dolejškova 2155/3, 182 23 Praha 8,

²Katedra biochemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Albertov 2030, 128 40 Praha 2, slachmanova@gmail.com

Volba reakčních podmínek pro zvýšení výtěžku žádaných enantiomerních produktů má obrovský význam pro chemický průmysl, zejména pro farmakologii, protože biologické vlastnosti jednotlivých enantiomerů se často markantně liší. Řešení daného problému poskytuje využití katalytických vlastností syntetických metaloproteinů v enantiospecifické syntéze.[1]

Cílem práce bylo navrhnout metodu, která umožní rychlé a levné zjištění katalytické aktivity syntetických metaloproteinů na základě jejich elektrochemického chování, v konkrétním případě na základě katalytického vylučování vodíku. V práci byly použity tři organometalické komplexy ruthenia, které mohou mít katalytické vlastnosti i ve své volné formě. Prostředí proteinu může napomoci vzniku jednoho z enantiomerních produktů reakce ve vyšším výtěžku. Na redukci komplexů ruthenia kovalentně vázaných na volnou sulfhydrylovou skupinu papainu v aktivním centru enzymu ukážeme využití AC voltametrické metody jako indikátoru schopnosti syntetického metaloproteinu katalyzovat děje spojené s přenosem vodíkového atomu. AC voltametrie papainu vykazuje katalytickou vlnu

vylučování vodíku při $-1,8\text{V}$. Protein modifikovaný komplexem $[(\eta^6\text{-C}_6\text{H}_5(\text{CH}_2)_2\text{NHCO}(\text{CH}_2)\text{Cl})\text{Ru}(\text{N}^{\wedge}\text{N})\text{Cl}]\text{Cl}$ (PAP-1) vykazuje navíc katalytické vylučování vodíku i při $-1,55\text{V}$. U dalších dvou metaloproteinů nebyl tento katalytický signál pozorován. Ve shodě s elektrochemickým pozorováním byly v případě použití metaloproteinu PAP-1 prokázány katalytické vlastnosti, a to v případě katalýzy Dielsovy-Alderovy reakce a hydrogenace iminů a ketonů. [2] Na určení enantioselektivity hydrogenačních reakcí katalyzovaných tímto metaloproteinem se pracuje.

Tato práce byla finančně podpořena grantem GACR (203/08/1157) a GAAV IAA400400802.

[1] Letondor C., Ward T. R.: *ChemBioChem*, **2006**, 7, 1845-1852

[2] Talbi B., Haquette P., Martel A., de Montigny F., Fosse C., Cordier S., Roisnel T., Jaouen G., Salmain M.: *Dalton Trans.*, **2010**, 39, 5605-5607

1Po36 REDOX REACTIONS OF NOVEL PREPARED SELENADIAZOLOQUINOLONES STUDIED BY IN SITU UV-VIS-EPR SPECTROELECTROCHEMISTRY

Karol Lušpai, Zuzana Barbieriková, Peter Rapta, Vlasta Brezová, Andrej Staško

Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, karol.luspai@stuba.sk

Quinolones are important group of therapeutic agents. Synthesized selenadiazoloquinolone derivatives with differently positioned selenadiazoloquinolone ring and with various substituents were studied by EPR-UV-VIS spectroelectrochemistry to better understanding of their redox mechanism. EPR spectroscopy provides valuable information about generated paramagnetic species (radical ions) during electrochemical oxidation/reduction. Experiments were carried out in both aqueous and non-aqueous media and redox mechanism in different solvents is discussed.

This study was financially supported by Scientific Grant Agency of the Ministry of Education of the Slovak Republic (Project VEGA 1/0018/09) and Research and Development Agency of the Slovak Republic (contract No. APVV 0339-10). Maroš Bella and Viktor Milata are gratefully acknowledged for synthesis of selenadiazoloquinolones.

- [1] Staško, A., Zalibera, M., Barbieriková, Z., Rimarčík, J., Lukeš, V., Bella, M., Milata, V., Brezová, V.: *Mag. Res. Chem.* 49 (2011) 168.
 [2] Barbieriková, Z., Bella, M., Kučerák, J., Milata, V., Jantová, S., Dvoranová, D., Veselá, M., Staško, A., Brezová, V.: *Photochem. Photobiol.* 87 (2011) 32.

1Po37

STANOVENÍ SACHARIDŮ V NÁPOJÍCH A POTRAVINÁCH POMOCÍ KAPILÁRNÍ ELEKTROFORÉZY S BEZKONTAKTNÍ VODIVOSTNÍ DETEKČÍ

Klára Málková¹, Petr Tůma¹, Eva Samcová¹

¹Ústav biochemie, molekulární a buněčné biologie, 3. lékařská fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Ruská 87, 100 00 Praha 10, klara.malkova@gmail.com

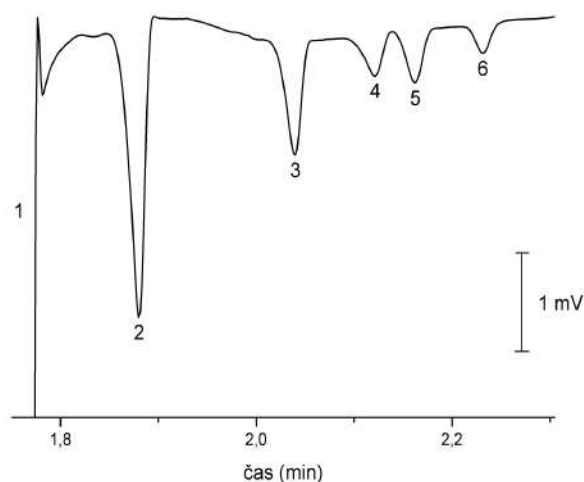
Mono- a disacharidy se běžně vyskytují v nápojích a potravinách. Velmi často se využívají jako potravinářské přísady. Jejich kvalitativní a kvantitativní analýza má tedy zásadní význam v potravinářské chemii.

Nejčastější metodou stanovení sacharidů je vysokoúčinná kapalinová chromatografie (HPLC) [1]. Dále se uplatňuje také plynová chromatografie (GC). V poslední době je pro analýzu neutrálních sacharidů stále více využívána kapilární elektroforéza (CE) [2]. Sacharidy obsahují hydroxylové skupiny, které disociují až v silně alkalickém prostředí. Další možnosti jsou CE separace využívající tvorbu komplexů s kyselinou boritou a ionty kovů, které jsou prováděny při nižších hodnotách pH. Problémem CE analýzy sacharidů je absence vhodných chromoforů, která omezuje využití fotometrické detekce. Řešením je nepřímá UV detekce nebo derivatizace sacharidů. Dalšími využívanými detekčními technikami jsou bezkontaktní vodivostní detekce (C^4D) nebo hmotnostní detekce s ionizací vzorku elektrosprejem (MS-ESI) [1].

V této práci byla pro stanovení mono- a disacharidů použita CE s bezkontaktní vodivostní detekcí. CE stanovení bylo prováděno v roztocích NaOH o koncentračním rozmezí 25-100 mmol/l, pH 12,5 – 12,9. Jako optimální byla zvolena koncentrace 75 mM NaOH, ve které bylo dosaženo doby separace směsi 6 sacharidů menší než 2,5 min (obr. 1).

Kalibrační závislosti jsou lineární v rozsahu koncentrací 25 - 250 mg/l s hodnotami korelačních koeficientů blízkých 1. Dosažené LOD jsou od 0,35 $\mu\text{mol/l}$ pro sacharózu do 0,71 $\mu\text{mol/l}$ pro fruktózu. Vyvinutá metoda byla

použita pro stanovení sacharidů v ovocných džusech, vínech, mléce, Coca-cole, pivu, medu a jogurtech. Vzorky byly pro CE stanovení upraveny pouze zředěním vodou a acetonitrilem, v některých případech ještě zfiltrvány [3].



Obr. 1 Elektroferogram vzorku jogurtu Jumbo.

Experimentální podmínky: křemenná kapilára o vnitřním průměru 5 μm , vnějším průměru 360 μm a celkové délce 33 cm, délka k detektoru 18 cm; separační elektrolyt: 75 mM NaOH (pH 12,8); hydrodynamické dávkování tlakem 50 mbar po dobu 80 s; separační napětí +15 kV. Úprava vzorku: 1g jogurtu byl rozpuštěn v 25 ml vody, zfiltrován a následně 10krát zředěn. Obsah ACN ve vzorku je 50% (v/v). Identifikace píků: 1- zóna elektroneutrálních látek, 2- sacharóza, 3- laktóza, 4- galaktóza, 5- glukóza, 6- fruktóza.

Autoři děkují Grantové agentuře Univerzity Karlovy v Praze. Projekt č. 389111.

- [1] S. Rovio, J. Yli-Kauhaluoma, H. Sirén: *Electrophoresis* 28, 3129 (2007).
 [2] A. V. Alekseeva, L. A. Kartsova, N. V. Kazachishcheva: *J. Anal. Chem.* 65, 202 (2010).
 [3] P. Tůma, K. Málková, E. Samcová, K. Štulík: *Anal. Chim. Acta* 698, 1 (2011).

1Po38
ON-LINE COUPLED
ISOTACHOPHORESIS-CAPILLARY ZONE
ELECTROPHORESIS SEPARATION AND
FIBER BASED SPECTRAL
PHOTOMETRIC DETECTION METHOD
FOR HIGHLY RELIABLE AND SENSITIVE
DETERMINATION OF QUININE IN
BEVERAGES

Katarína Maráková¹, Peter Mikuš¹, Juraj Piešťanský¹, Lucia Veizerová¹

Department of Pharmaceutical Analysis and Nuclear Pharmacy, Faculty of Pharmacy, Comenius University, Odbojárov 10, SK-832 32 Bratislava, Slovak Republic marakova@fpharm.uniba.sk

The present work illustrates possibilities of a column coupling capillary electrophoresis (CE-CE) separation technique combined with diode array detector (DAD) for the direct, selective, and sensitive determination of quinine (QUI) in a real multicomponent ionic matrices (beverages).

Capillary isotachopheresis (ITP) served as an ideal injection technique in CE-CE. Due to the ITP sample pre-separation and preconcentration, an absorbance photometric detection was sufficient for obtaining very low concentration limits of detection (~2.3 ng/ml). Besides this parameter, other excellent performance parameters (separation efficiency, linearity, precision, recovery, robustness) could be obtained using optimized ITP-CZE method too.

The DAD detection was utilized for the characterization of composition of separated zones via differences in corresponding UV-VIS spectra (scanned in interval 200-800 nm). It was demonstrated, through the spectral analysis, that the proposed separation method was selective enough to produce spectrally homogeneous analyte zones without any interfering compound from the real matrices. Moreover, a preliminary evaluation of unknown peaks in electrophoreogram could be easily made for monitoring possible structurally related compounds, e.g. degradation products of the analyte.

Successful validation and application of the proposed ITP-CZE-DAD method suggest its routine use in a highly effective and reliable analysis of the quinine and related impurities in real beverage samples.

Acknowledgement: This work was supported by the grant of Comenius University UK/25/2011, grants of

Faculty of Pharmacy FaFUK/4/2011 and FaFUK/7/2011.

1Po39
STUDIUM MOŽNOSTÍ DEKONTAMINACE
ORGANICKÉ FÁZE VZNIKAJÍCÍ PŘI
TODGA PROCESU

Kamil Vavřinec Mareš¹, Jan John¹, Mojmír Němec¹

¹*ČVUT-FJFI-Katedra jaderné chemie, Břehová 7, 115 19 Praha, k.v.mares@gmail.com*

Jedním z velice aktuálních témat jaderné energetiky je přepracování vyhořelého jaderného paliva. Tato diplomová práce se zaměřuje na studium možností dekontaminace organické fáze vznikající při TODGA procesu. Po zavedení analytické metody rentgenfluorescenční analýzy bylo provedeno testování široké škály sorbentů za účelem odstranění ruthenia a yttria z kontaminované organické fáze tzv. „spent solvent“. Na základě vyhodnocení hodnot hmotnostních rozdělovacích koeficientů D_g se perspektivním sorbentem ukázal být Amberlyst A26, poté byla testována kinetika sorpce ruthenia a yttria na tento makroporézní bazický iontoměnič.

Tato práce vznikla za podpory grantu ČVUT SGS 11/071/OHK4/1T/14

- [1] JENKINS, R.; GOULD, R., W.; GEDCKE, D.: *Quantitative X-Ray Spectrometry*. Edited by BRAME, E., D. Marcel Dekker, 1995, 484 p.
- [2] MODOLO, G.; VIJGEN, H.; SCHREINEMACHERS, C.; BARON, P.; DINH, B: *TODGA Process Development for Partitioning of Actinides(III) from PUREX Raffinate*. In proc.: Global, LA November 16-20, 2003, p.1926-1930

1Po40
STANOVENÍ KLINICKY VÝZNAMNÝCH
LÁTEK METODOU HPLC

Jana Matějčková¹, Martin Jaček¹, Eva Samcová¹

¹*Ústav biochemie, buněčné a molekulární biologie, 3. Lékařská fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Ruská 87, Praha 10, 100 00 Česká republika jana.matejckova@seznam.cz*

V naší práci byla optimalizována HPLC metoda pro stanovení malondialdehydu v krevní plazmě. Malondialdehyd (MDA), jako hlavní biomarker oxidativního poškození, je produktem peroxidace nenasycených mastných kyselin a může být zdrojem poškození buněčných struktur, především pak interakcí s DNA a proteiny např.

tvorbou různých aduktů. Zvýšená hladina malondialdehydu se vyskytuje u kuřáků, u pacientů s rakovinou prsu, plic, gynekologických nádorů, u pacientů s diabetem mellitem a řady dalších onemocnění.

Optimalizovali jsme HPLC metodu stanovení MDA v krevní plazmě po derivatizaci vzorku 2,4-dinitrophenylhydrazinem [1]. Jako interní standard byl použit methylmalondialdehyd. K separaci byla použita kolona 100 x 3 mm, která umožňuje rychlou analýzu. Jako mobilní fáze byla použita směs acetonitril: H₂O (40: 60 v/v, přídavek 3,6 ml kyseliny octové na 930 ml vody) s konstantním průtokem 0,4 ml/min. Limit detekce této metody je 0,27 μmol/l a je dostatečně nízký pro stanovení biomarkeru MDA v reálných vzorcích krve. Opakovatelnost stanovení s koeficientem variace pro plochu píku 2,7 % je vyhovující a odpovídá opakovatelnosti běžných chromatografických stanovení spojených s derivatizací vzorku.

Metoda byla použita pro stanovení koncentrace MDA v plazmě u pacientek s karcinomem dělohy a vaječníků. Pacientky s karcinomem měly plazmatickou hladinu MDA 11,8 ± 1,5 μmol/l. Tato hladina byla 1,7x vyšší v porovnání se zdravými kontrolami, u kterých byly nalezeny koncentrace MDA v plazmě 6,9 ± 1,58 μmol/l.

Dále byl sledován vliv podání vitamínu E pacientkám s tímto onkologickým onemocněním. Pacientkám byl podán vitamin E (1200 mg) 1 den před onkologickou operací, kdy byl proveden první odběr krve. Další odběr byl proveden 1 hodinu po operaci, poslední 24 hodin po operaci. Pacientky, kterým byl podán vitamin E, měly významně nižší plazmatickou hladinu MDA 1 hodinu po operaci v porovnání s kontrolami. Druhý den po operaci se hladina MDA vrátila na plazmatickou koncentraci stejnou, jaká byla před operací. Pacientkám, kterým nebyl podán vitamin E, se hladina MDA po operaci zvýšila a i druhý den po operaci hladina MDA neklesala. Metoda HPLC je v současné době optimalizována rovněž pro stanovení anestetik fentanylů a sufentanilu v biologickém materiálu .

Práce je podporována grantem IGA NT 11284-4-2010

[1] Sim A. S., Salonikas Ch., Naidoo D., Wilcken D. E. L.: J Chromatogr., B 785, 337 – 344, 2003.

1Po41 ANALYTICKÉ ASPEKTY ON-LINE KOMBINÁCIE ZÓNOVÁ ELEKTROFORÉZA – ZÓNOVÁ ELEKTROFORÉZA NA ČIPE V ANALÝZE MNOHOZLOŽKOVÝCH ZMESÍ IÓNOGÉNNÝCH LÁTOK

Milan Luc¹, Marián Masár¹

¹Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra analytickej chémie, Mlynská dolina CH-2, 842 15 Bratislava, luc@fns.uniba.sk

Práca bola zameraná na on-line kombináciu zónová elektroforéza – zónová elektroforéza (ZE-ZE) [1] na čipe so systémom spájania kolón („column-coupling“, CC) [2]. Definovaný prenos analytu/-ov z prvého do druhého separačného stupňa s minimálnym počtom interferujúcich zložiek zabezpečovala technika prepínania kolón („column-switching“, CS) realizovaná cez časovo-riadené prepínanie smeru hnacieho prúdu medzi separačnými kanálkami na CC čipe. ZE-ZE experimenty boli uskutočnené v modelovej (13 anorganických a organických kyselín) a reálnej vzorke (modelová vzorka „spikovaná“ 25-krát riedeným močom reprezentujúcim multikomponentnú biologickú maticu). Za preferovaných pracovných podmienok (eliminovaný hydrodynamický a elektro-osmotický tok) boli získané vysoké reprodukovateľnosti kvalitatívnych (RSD migračných časov do 0,4 %) a kvantitatívnych parametrov analytov (RSD plôch píkov do 2,9 %). Výťažnosti analytov prenesených z prvého do druhého ZE stupňa na CC čipe boli v rozmedzí 94-101 %.

V reálnej vzorke (moč) bol študovaný vplyv maticových zložiek na kvalitatívne a kvantitatívne parametre modelových analytov. RSD migračných časov analytov boli do 0,5 %. RSD plôch píkov boli v intervale 1,1-4,9 %. Výťažnosti analytov v reálnej vzorke prenesených z prvého do druhého separačného stupňa na CC čipe sa pohybovali v rozmedzí 95-105 %.

Výsledky práce jednoznačne ukazujú významný analytický potenciál ZE-ZE kombinácie na CC čipe najmä v situáciách, keď je stopový analyt prítomný v multikomponentnej vzorke s rozličným koncentračným zastúpením jednotlivých zložiek.

Táto práca bola podporená grantovými agentúrami VEGA (č. 1/0672/09), APVV (VVCE-0070-07) a GUK (UK/307/2009).

[1] Dušan Kaniansky, Marián Masár, Mariana Danková, Róbert Bodor, Renáta Rákociová, Michaela Pilná, Matthias Jöhnck, Bernd Stanislawski, Slavomír Kajan: *J. Chromatogr. A* 1051, 33 (2004).

[2] Dušan Kaniansky, Marián Masár, Róbert Bodor., Mária Žúborová, Eva Ólvecká, Matthias Jöhnck, Bernd Stanislawski: *Electrophoresis* 24, 2208 (2003)

1Po42

EPR SPECTROSCOPY OF SOL-GEL REACTION MIXTURE DOPPED WITH TRANSITION METAL IONS

Lucia Husáriková, Milan Mazúr

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

Resonance spectroscopy (NMR and EPR) methods are useful tools for study of structure and properties of sol-gel products. Unfortunately, EPR spectroscopy of sol-gel process requires the addition of spin labels, e.g. transition metal ions, into sol-gel reaction mixture. Corresponding EPR spectra are then very sensitive to the changes in local environment of these paramagnetic labels. In this presentation, the time evolution of silica sol-gel process was monitored using EPR spectroscopy of Cu(II) and VO(II) transition metal ions. Computer simulations of composite Cu(II) and VO(II) EPR spectra recorded at room temperature and liquid nitrogen temperature (77 K) showed that the superpositions of three main types of individual subspectra were appeared during time evolution of sol-gel process: Γ 1-type, which corresponds to the highly condensed and rigid polymer network of Si-O-Si skeleton. Γ 2-type, which belongs to a looser structure of the gel skeleton with many vacancies of various size. Φ -type, which corresponds to high viscous, water-like environment. Relative distributions of these three individual subspectra are significantly different in the various steps of sol-gel process. It is clear that time evolution of sol-gel process can be successfully monitored by EPR spectroscopy using transition metal ions as spin labels.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contact No. (APVV-0202-10 and APVV-0339-10) and by Slovak Grand Agency for Science (VEGA 1/0856/11 and VEGA 1/0018/09).

1Po43

POROVNÁNÍ UHLÍKOVÝCH PASTOVÝCH ELEKTROD VYROBENÝCH Z RŮZNĚ VELKÝCH MIKROKULIČEK SKELNÉHO UHLÍKU

Lenka Němcová¹, Jiří Zima², Jiří Barek³

Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO Laboratoř environmentální elektrochemie, Albertov 6, 128 43 Praha 2, Česká republika, ¹nemcova.len@seznam.cz, ²zima@natur.cuni.cz, ³barek@natur.cuni.cz

Byly zkoumány voltametrické vlastnosti uhlíkových pastových elektrod (CPE) [1,2] připravených z různě velkých mikrokuliček skelného uhlíku a minerálního oleje, a to pomocí DC voltametrie, diferenčně pulzní voltametrie (DPV) a cyklické voltametrie (CV). Připraveny byly tři CPE s obsahem 250 mg mikrokuliček skelného uhlíku s průměry 0,4–12 μm , 10–20 μm , 20–50 μm . Všechny testované CPE byly připraveny stejným způsobem ve stejný den. Pomocí CV byly zjišťovány šířky potenciálových oken v různých základních elektrolytech (0,1 M NaOH, KCl, HClO₄, H₂SO₄ a Brittonův-Robinsonův pufr pH 2, 7 a 12). Elektrochemické vlastnosti byly testovány pomocí hexakvanoželeznanu draselného ve vodném základním elektrolytu a pomocí 5-amino-6-nitrochinolinu (5A6NQ) ve vodně-methanolicím základním elektrolytu. 5A6NQ patří mezi nitro- a aminoderiváty heterocyklických uhlovodíků, které jsou často karcinogenní a mutagenní. 5A6NQ byl zvolen jako modelová organická látka, protože jeho voltametrické chování při oxidaci ve vodně-methanolicím prostředí je již známé [3].

Ze získaných výsledků vyplývá, že se zvětšující se velikostí mikrokuliček v pastě se CPE mnohem snáze pasivuje a dosažené limity detekce pro systém Fe^{II}/Fe^{III} a 5A6NQ pomocí DPV a DCV se zvyšují. CPE s nejmenšími mikrokuličkami skelného uhlíku (0,4–12 μm) byla celkově vyhodnocena jako nejvhodnější z hlediska testovaných elektrochemických vlastností.

Tato práce vznikla za podpory Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR (projekt LC 06035, MSM 0021620857, RP 14/63 a KONTAK(AMVIS) projekt ME10004 (NEMVAD)), projektu SVV SVV 2011-263204 a Technologické agentury České Republiky (projekt TA01020565)

[1] Ivan Švancara, Karel Vytřas, Kurt Kalcher, Alain Walcarius, Joseph Wang: *Electroanalysis* 21, 7 (2009).

- [2] Jiří Zima, Anca-Iulia Stoica, Alice Zítová, Jiří Barek: *Electroanalysis* 18, 158 (2006).
 [3] Lenka Němcová, Jiří Zima, Jiří Barek: *Coll. Czech. Chem. Commun.* 74, 1477 (2009).

1Po44
POLAROGRAPHIC AND
VOLTAMMETRIC DETERMINATION OF
FLUORODIFEN

Vít Novotný¹, Etela Kouklíková¹, Jiří Barek¹

¹*UNESCO Laboratory of Environmental Electrochemistry, Department of Analytical Chemistry, Charles University, Albertov 2030, CZ-128 43 Prague 2, Czech Republic*

The herbicide fluorodifen has been developed for the preemergence protection of soybeans against weeds. Compounds with similar structure exhibit toxicity toward aquatic organisms are endocrine disruptors and interfere with blood formation¹. Many methods have been developed for the determination of fluorodifen, mainly HPLC with UV detection, Voltammetric and polarographic techniques offer a cheap, reliable and sensitive way of determining important agrochemicals in various matrices², this work is a continuation of many previous successful efforts at monitoring electroactive pollutants^{2,3}.

The differential pulse polarographic behaviour of fluorodifen at a DME has been studied in the pH range 2-12, the optimum conditions of the determination were in a mixture of BR buffer pH 11 – methanol 1:1. The behaviour has been investigated in the concentration range $1 \cdot 10^{-4}$ – $2 \cdot 10^{-6}$ mol·dm⁻³. The detection limit reached is $1 \cdot 10^{-6}$ mol·dm⁻³. The differential pulse voltammetric behaviour of fluorodifen a AgSAE has been studied in the pH range 2-12, the optimum conditions of the determination were in a mixture of BR buffer pH 6 – methanol 1:1. The behaviour has been investigated in the concentration range $1 \cdot 10^{-4}$ – $2 \cdot 10^{-6}$ mol·dm⁻³. The detection limit reached is $2 \cdot 10^{-5}$ mol·dm⁻³.

Financial support of this work, provided by The Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (Projects MSM0021620857, LC 06035, and RP 14/63), by the Technological Agency of Czech Republic (Project TA01020565), and by the Project SVV 2011-263204, is gratefully acknowledged.

- [1] Teshima, R., Nakamura, R., Nakajima, O., Hachisuka, A., Sawada, J.-I.: *Toxicol. Lett.* 150, 277 (2004).
 [2] Yosypchuk, B., Berek, J.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 39, 189 (2009).

- [3] Novotný, V., Berek, J.: *Chem. Listy* 103, 217 (2009).

1Po45
VPLYV ZWITTERIONICKÝCH
DETERGENTOV NA ZÓNOVO
ELEKTROFORETICKÚ SEPARÁCIU
HUMÍNOVÝCH KYSELÍN
S IZOTACHOFRETICKOU
PREDÚPRAVOU

Andrea Pastierová¹, Róbert Bodor¹, Dušan Kaniansky¹

¹*Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského v Bratislave, Katedra analytickej chémie Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, pastierova@fns.uniba.sk*

Kapilárna izotachoforéza-zónová elektroforéza, uskutočnená použitím techniky so spájanými kolónami s hydrodynamicky uzavretým systémom bola študovaná v súvislosti so separáciou humínových kyselín. V práci bol študovaný vplyv zwitterionických detergentov: N-decyl-N,N-dimetyl-3-amino-1-propán sulfónovej kyseliny; N-dodecyl-N,N-dimetyl-3-amino-1-propán sulfónovej kyseliny; N-tetradecyl-N,N-dimetyl-3-amino-1-propán sulfónovej kyseliny ako modifikátorov elektrolytu na efektívnu pohyblivosť humínových kyselín. Zistilo sa, že tieto detergenty znižujú pohyblivosť humínových kyselín, ak ich koncentrácia v nosnom elektrolyte je vyššia ako kritická micelárna koncentrácia (CMC) (tvorba micel). CMC sú pre DAPS (25-40 mmol/l), pre DDAPS (2-4 mmol/l) a pre TDAPS (0,1-0,4 mmol/l). Na zistenie distribúcie látok podľa mólovej hmotnosti (M) v použitej vzorke humínových kyselín bola použitá ultrafiltrácia. Zistilo sa, že za použitých experimentálnych podmienok ultrafiltrácie (iónová sila, koncentrácia humínových kyselín), okolo 70% zo všetkých zložiek vzorky absorbujúcich UV-žiarenie je prítomných vo frakcii s mólovou hmotnosťou >30 000. Podiel látok s M>10 000 bol iba o 10% vyšší ako frakcie s M>30000.

Táto práca vznikla za podpory projektov:UK/39/2011 VEGA 1/0882/09, VVCE 0070/07

1Po46**HMOTNOSTNÁ SPEKTROMETRIA ROZKLADU CHOLESTEROLU NA POVRCHU FOTOKATALYZÁTORA TiO₂**

Michal Procházka¹, Monika Stupavská^{1,2}, Dušan Velič^{1,2}

¹Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina, 842 15, Bratislava, missoprochazka@gmail.com

²Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava

Oxid titaničitý (TiO₂) je polovodičový fotokatalyzátor so šírkou zakázaného pásu 3,2 eV. Pôsobením UV svetla s vlnovou dĺžkou menej ako 388 nm môže dôjsť k vzniku páru elektrón–diera. A ak nedôjde k rekombinácii náboja, môže dôjsť k redoxným reakciám, pri ktorých vznikajú z naadsorbovanej vody a kyslíka veľmi reaktívne častice, ·OH radikál a superkyslík ·O₂⁻. Tie následne spôsobujú degradáciu organických molekúl na povrchu. [1] Cieľom tejto práce bolo sledovanie degradácie cholesterolu na povrchu TiO₂ v závislosti od dĺžky ožarovania UV svetlom [2] pomocou hmotnostnej spektrometrie sekundárnych iónov (SIMS). [3]

V práci boli použité vzorky cholesterolu nanosené na sklenenom substráte s tenkým filmom nanokryštalického TiO₂ bez ožarovania a s dobou ožarovania UV svetlom 1, 3, 7, 16 a 24 hodín.

V spektrách je dobre stanovená závislosť znižovania intenzity píkov zodpovedajúcim fragmentom cholesterolu [M–OH]⁺ a [M–H]⁺ v závislosti od dĺžky ožarovania vzoriek UV svetlom. Pri ožarovaní povrchu UV svetlom dochádza k jeho čisteniu, čomu napovedá aj pokles intenzity [M–OH]⁺ o 46% po 7 hodinách, o 72% po 16 hodinách a až o 88% po 24 hodinách ožarovania v porovnaní s cholesterolom na neožiarenom TiO₂. Predpokladá sa, že ešte dlhším ožarovaním by došlo k úplnému vyčisteniu povrchu od cholesterolu.

Táto publikácia bola vytvorená realizáciou projektu „meta-QUTE: Centrum excelentnosti kvantových technológií“, na základe podpory operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja a tiež grantu APVV-0491-07.

[1] A. Fujishima, T.N. Rao, D.A. Tryk, J. Photochem. Photobiol. C: Photochem. Rev. 1 (2000) 1–21.

[2] M.R. Hoffmann, S.T. Martin, W. Coi, D.W. Bahnemann, Chem. Rev 95 (1995) 69–96.

[3] M. Aranyosiová, ChemZi 2/2 (2006) 52–53.

1Po47**SPEKTROFOTOMETRIE A ELEKTROCHEMIE QUERCETINU V PŘIROZENÝCH PODMÍNKÁCH**

Šárka Ramešová^{1,2}, Romana Sokolová¹, Ján Žabka¹, Ilaria Degano³

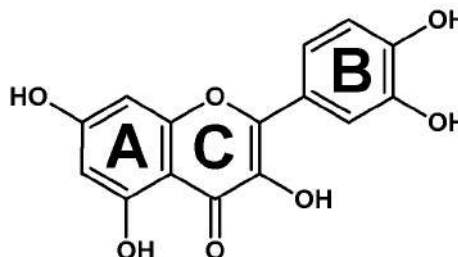
¹ Ústav fyzikální chemie J.Heyrovského AV ČR, v.v.i., Dolejškova 3, 182 23 Praha 8
e-mail: sarka.tce@seznam.cz

² Karlova Univerzita v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, Albertov 2030/6, 128 43 Praha 2

³ Department of Chemistry and Industrial Chemistry, University of Pisa, Via Risorgimento 35, 56100 Pisa, Italy

Quercetin (3,3',4',5,7-pentahydroxyflavon, obr. 1), je jeden z nejhojněji se vyskytujících flavonoidů přítomných v ovoci a zelenině. Díky své chemické struktuře vykazuje mimořádné antioxidační schopnosti a je účinnějším antioxidantem než vitamín C a E.

Tato intenzivně barevná polyfenolická látka patří do skupiny přirozeně vyskytujících se sloučenin flavonoidů a v minulosti byla hojně využívána jako barvivo na umělecké památky [1].



Obr 1: Chemická struktura quercetinu

Byla studována oxidace quercetinu a degradační procesy pomocí elektrochemických metod a UV/Vis spektroskopie ve vodném prostředí. Na základě výsledků byl navržen oxidační mechanismus a byl zjištěn hlavní oxidační produkt oxidace (2-(3',4'-dihydroxybenzoyl)-2,4,6-trihydroxybenzofuran-3(2H)-on), který vzniká hydroxylací nestálého meziprojektu [2]. Tento produkt se však vlivem kyslíku dále rozkládá na další oxidační produkty, a proto stabilita látky významně závisí na přítomnosti vzdušného kyslíku. Distribuce oxidačních produktů quercetinu ve vodném prostředí v rámci působení kyslíku byla sledována pomocí LC-MS/MS a LC-DAD analýzy [3].

Tento výzkum byl finančně podporován z grantu GAČR 203/09/1607, MŠMT ČR (projekt MSM0021620857) a projektem SVV 2011-263204.

- [1] Colombini M. P., Andreotti A., Baraldi C., Degano I., Łucejko J. J.: *Microchemical Journal* **85**, 174, (2007).
- [2] Sokolova R., Degano I., Bulíčková J., Ramešová Š., Hromadová M., Gál M., Fiedler J., Valášek M.: *Electrochim. Acta* 2011, DOI 10.1016/j.electacta.2011.04.121.
- [3] Ramešová Š., Sokolová R., Degano I., Žabka J., Bulíčková J., Gál M.: *Analyst* 2011, submitted.

1Po48

THE COMPARISON OF TWO ANALYTICAL METHODS FOR DETERMINATION OF ETHOXYACETIC ACID IN HUMAN URINE OF ETHOXYETHANOL-EXPOSED PEOPLE

Lucie Rimnacova^{1,2}, Petr Simek¹, Jaroslav Mraz³, Ilona Sperlingova³

¹ *Biology Centre, Academy of Sciences of the Czech Republic, Laboratory of Analytical Biochemistry, Branisovska 31, 370 05 Ceske Budejovice, Czech Republic, rimnacova@bclab.eu*

² *Charles University in Prague, Faculty of Natural Sciences, Department of Analytical Chemistry, 128 40 Prague Albertov, Czech Republic*

³ *Centre of Public Health Laboratories, National Institute of Public Health, Srobarova 48, 100 42 Prague 10, Czech Republic*

Many important industrial organic pollutants are excreted from an organism into the urine as carboxylic acid, which are determined as biomarkers of exposure. Ethoxyacetic acid (EAA) in urine is the biomarker of ethoxyethanol. This urinary metabolite is responsible for observed neurotoxic and reproductive effects [1]. The comparison of two analytical methods for determination EAA in human urine is represented in this poster. The urinary samples were obtained from healthy volunteers who were exposed for 4 hours to ethoxyethanol and these samples were processed by two methods. The first method used derivatization with ethyl chloroformate [2] and second one derivatization with N-(tert-butyl dimethylsilyl)-N-methyl-trifluoroacetamide (MTBSTFA) [3]. Both series of derivatives were measured by GC-MS. The results showed the good correlation therefore both methods are suitable for accurate determination of EAA in urine.

The work was supported by the Grant Agency of Charles University in Prague project No. 54009.

- [1] Larry K. Lowry: *Toxicol Lett*, **77**, 31 – 378, 1995.
- [2] Rimnacová L, Cimlova J, Simek P, Husek P, Mraz J: *Anal Chem* 2011, (submitted).

- [3] Ilona Sperlingova, Ludmila Dabrowska, Vladimir Stransky, Sarka Duskova, Jan Kucera, Monika Tvrđikova, Milon Tichy: *Anal Bioanal Chem*, **397**, 433 – 438, 2010.

1Po49

VOLTAMETRICKÉ A AMPEROMETRICKÉ STANOVENÍ 5-NITROCHINOLINU V PITNÉ A ŘIČNÍ VODĚ POMOCÍ UHLÍKOVÉ FILMOVÉ ELEKTRODY

Tereza Rumlová, Ivan Jiránek, Jiří Barek

Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Hlavova 2030/80, CZ-12843 Praha 2, Česká republika, rumlovat@gmail.com

Tato práce je zaměřena na optimalizaci a aplikaci voltametrických metod pro stanovení 5-nitrochinolinu (5-NQ) v modelových vzorcích pitné a říční vody při použití uhlíkové filmové elektrody (CFE). 5-NQ patří mezi nitrované aromatické heterocyklické sloučeniny a je řazen mezi cytotoxické látky [1-2]. Výhodou uhlíkové filmové elektrody je především široké potenciálové okno v anodické i katodické oblasti a její nízká zátěž pro životní prostředí oproti rtuťovým elektrodám [3]. V rámci předkládané práce byly sledovány probíhající elektrochemické děje pomocí metod cyklické voltametrie (CV) a adsorpční rozpouštěcí voltametrie (AdSV). Pro stanovení 5-NQ v modelových vzorcích vody byla vybrána metoda diferenční pulsní voltametrie (DPV) a průtoková injekční analýza (FIA). Byla zkoumána možnost extrakce na tuhé fázi (SPE) jako předstupu pro metodu DPV. Stanovení 5-NQ na CFE je založeno na probíhající katodické redukci přítomné nitroskupiny. Lze konstatovat, že v této práci byla prokázána použitelnost CFE pro stanovení submikromolárních koncentrací 5-NQ v modelových vzorcích vody.

Tato práce byla finančně podpořena Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (projekty LC 06035, MSM 0021620857 a RP 14/63), Technologickou agenturou České republiky (projekt TA01020565) a projektem SVV 2011-263204..

- [1] Siim B. G., Atwell G. J., Anderson R. F., Wardman P., Pullen S. M., Wilson W. R., Denny W. A.: *J. Med. Chem.* **40**, 1381 (1997).
- [2] Siim B. G., Atwell G. J., Wilson W. R.: *Biochem. Pharm.* **48**, 1593 (1994).
- [3] Yosypchuk B., Barek J., Fojta M.: *Electroanalysis* **18**, 1126 (2006).

1Po50 VYUŽITIE NIR SPEKTROSKOPIE K STANOVENIU STUPŇA ESTERIFIKÁCIE PEKTÍNŮV.

Vlasta Sasinková, Anna Malovíková

Chemický ústav, Centrum glykomiky, SAV, Dúbravská
cesta 9, SK-845 38 Bratislava, Slovensko,
chemsasi@savba.sk

Cieľom práce je využitie NIR spektroskopie pri analýze metylesterifikovaných citrusových pektínov. Výhodou tejto techniky je rýchlosť získania údajov, keďže si nevyžaduje predchádzajúcu úpravu vzorky, vzorky sa merajú priamo cez sklenené flaštičky. Spektrá sa merali na spektrofotometri Nicolet 6700 a spracovali pomocou programu OMNIC 8.1. Pre merania v blízkej IR oblasti sa použil nástavec Smart Near-IR UpDRIFT. Pektan a pektínany draselné s rôznym stupňom esterifikácie (E 0 – 94 %) sa merali v oblasti 10 000 – 4000 cm⁻¹. Pre analýzu sa využil absorpčný pás prvého overtónu kombinačného pásu C-H valenčnej vibrácie a C-H deformačnej vibrácie z CH₃ skupiny metylesteru (~ 4450 cm⁻¹) [1,2]. Pre kvantitatívne vyhodnotenie sa aplikoval program TQ analyst zahrňujúci použitie PCA ako aj PLS metódy. Získané výsledky sa porovnali s metódou stanovenia E metylesterifikovaných pektínov pomocou FTIR ATR spektroskopie [3].

Práca bola finančne podporená Slovenskou grantovou agentúrou VEGA, projektami č. 1/0529/09 a 2/0062/09.

- [1] A.Polesello, R.Giangiacomo, E. Forni, E. Braga: Carbohydr. polym. 12 (1990) 27-38
[2] Hanne Wining, Nanna Viereck, Tina Salomonsen, Jan Larsen, Søren B. Engelsen: Carbohydr. Res. 344 (2009) 1833-1841
[3] Vlasta Sasinková, Anna Malovíková: ChemZi, (2009) 1Po24

1Po51 MATRIX RELATED ASPECTS OF TRYPTOPHAN ANALYSIS

M. Stupavska¹, M. Jerigova^{1,2}, D. Velic^{1,2}

¹Faculty of Natural Sciences, Comenius University,
Mlynska dolina, 841 04 Bratislava, Slovak Republic

²International Laser Center, Ilkovicova 3, 812 19
Bratislava, Slovak Republic com

The SIMS technique is matrix dependent analytical tool. Most of the matrix enhanced in SIMS rely on direct chemical interaction increasing the yield. Using the strategy to utilize solid matrix of bioorganic MS applications [1, 2],

ionization by alkaline earth metal salts in the presence of graphite is investigated. A focus is on the most useful analytical effect, observed using cluster primary ion beam analysis on bulk biomolecular solids, which is an increase of the molecular secondary ion yield. Results suggest that the cellulose matrix [2] probably inhibited and suppressed emission of analyte ions. The inert graphite matrix might mediate desorption and ionization and through this comparative study, several aspects of sputtering event were considered.

D- Tryptophan was determined by ToF-SIMS under impact of 25 keV Bi⁺ and Bi₃⁺ beams. Pellets containing tryptophan analyte embedded in complex matrix are analyzed. Matrix is a solid mixture of alkaline earth metal salts CaCO₃, BaCO₃, SrCO₃ and graphite.

This research was supported by ERDF OP R&D, Project 'meta-QUTE- Centrum excelentnosti kvantových technológií' and APVV-0491-07.

- [1] M. Marksteiner et al.: J. Am. Soc. Mass Spectrom. 2008, 19, 1021–1026
[2] M. Stupavska et al.: Surf. Interface Anal. 2011, 43, 462 – 466

1Po52 PŘÍPRAVA A VYUŽITÍ NANOČÁSTIC ZNS A CDS PRO FOTODEGRADACI FENOLU VE VODNÝCH ROZTOCÍCH

Petra Horíková¹, Ladislav Svoboda¹, Jakub Matys¹, Ondřej Kozák¹, Petr Praus¹

¹VŠB-TU Ostrava, 17.listopadu 15/2172, 708 33
Ostrava-Poruba, petr.praus@vsb.cz

Fenol a jeho deriváty patří mezi organické polutanty, které jsou toxické a karcinogenní. Nejčastějším zdrojem fenolu jsou průmyslové odpadní vody. Cílem této práce bylo připravit nanočástice polovodičů ZnS a CdS, které byly následně využity pro fotodegradaci fenolu ve vodných roztocích.

Nanočástice ZnS a CdS byly připraveny srážením v přítomnosti tenzidu - cetyltrimethylamonia (CTA) a následně deponovány na fylosilikát montmorillonit (MMT) [1,2]. Velikost nanočástic byla stanovena ze snímků transmisní elektronové mikroskopie a vypočtena z hodnot energií zakázaného pásu určených z absorpčních spekter jejich koloidních disperzí s CTA. Vzniklé nanokompozity ZnS-MMT-CTA a CdS-MMT-CTA byly použity pro fotokatalytickou degradaci

fenolu v různých časových intervalech (2 min až 3 hod). Rozklad fenolu byl prováděn ve vsádkovém reaktoru se zabudovanou UV lampou. Koncentrace fenolu během reakce byla měřena spektrofotometricky metodou s *p*-nitroanilinem.

Účinnost degradace těchto nanokompozitů byla srovnávána s běžně využívaným fotokatalyzátorem TiO₂ (Evonik P25). Rozklad fenolu v přítomnosti TiO₂ i nanočástic ZnS a CdS byl velmi dobře popsán kinetickými rovnicemi pseudoprvního řádu, které odpovídají reakci fenolu s mnohonásobným přebytkem hydroxylových radikálů generovaných na povrchu polovodičů. Produkty degradace byly sledovány pomocí plynové a kapalinové chromatografie a kapilární izotachoforézy. Byly nalezeny pouze stopové koncentrace dihydroxybenzenů a difenolů, jakožto meziproductů počátečních reakcí fenolu s OH radikály.

Autoři děkují grantu specifického výzkumu SP2011/49 (FMFI, VŠB-TUO) za finanční podporu.

- [1] Kozák O., Praus P., Kočí K., Klementová M.: Preparation and characterization of ZnS nanoparticles deposited on montmorillonite. *J. Colloid Interface Sci.* 352 (2010) 244-251.2
- [2] Praus P., Kozák O., Kočí K., Panáček A., Dvorský R.: CdS nanoparticles deposited on montmorillonite: preparation, characterization and application for photoreduction of carbon dioxide. *J. Colloid Interface Sci.* 360 (2011) 574-579.

1Po53 PŘÍPRAVA NANOČÁSTIC STŘÍBRA V SYSTÉMU VODA-ALKOHOL

Tomáš Svobodník¹, Libor Kvítek¹, Aleš Panáček¹, Robert Pucek¹

¹Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů a Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého, Tř. 17. listopadu 12, 77146 Olomouc

Nanočástice stříbra jsou díky svým vlastnostem hojně studovaným subjektem v nanomateriálovém výzkumu. Mezi ně patří hlavně optické a katalytické vlastnosti a také vysoká antibakteriální aktivita, která je díky neexistující bakteriální rezistenci využívána již dnes v řadě komerčních produktů.

Tato práce je zaměřená na studium přípravy disperzí nanočástic stříbra (AgNPs) v nevodných prostředích. Byly testovány tři základní alkoholy – metanol, etanol a propanol. AgNPs byly připraveny pomocí modifikovaného Tollensova

postupu, tedy redukcí kationtu [Ag(NH₃)₂]⁺ maltózou [1]. Postupně byl zvyšován obsah alkoholu v reakční směsi a byla sledována změna vlastností připravené disperze nanočástic. Mezi základní studované vlastnosti patřila velikost a polydisperzita připravených nanočástic a také jejich agregátní stabilita. Tyto vlastnosti byly studovány pomocí DLS metody a potvrzeny UV/VIS spektry. Velikost a s ní související polydisperzita připravených AgNPs jsou závislé na použitém alkoholu a také na objemové koncentraci alkoholu. Velikost nanočástic se pohybovala řádově mezi 20 – 60 nm a rostla se zvyšujícím se obsahem alkoholu pouze pro methanol a ethanol, u propanolu byl pozorován naopak mírný pokles velikosti. Agregátní stabilita nad hranici 40 objemových procent alkoholu v reakční směsi prudce klesá pro methanol a ethanol, u propanolu je tato hranice již 30 objemových procent.

Tato práce byla podpořena projekty OP VaVpI reg. číslo CZ.1.05/2.1.00/03.0058, MŠMT ČR MSM6198959218 a MSM6198959223, GAČR GAP304/10/1316 a vnitřním grantem UP Olomouc PrF_2011_020.

- [1] L. Kvítek, R. Pucek, A. Panáček, R. Novotný, J. Hrbáč, R. Zbořil: *J. Mat. Chem.* 15, 1099 (2005)

1Po54 INFLUENCE OF METHACRYLIC ACID ADDITION ON THE SEPARATION PERFORMANCE OF POLYSTYRENE- BASED MONOLITH

Adéla Svobodová¹, Jiří Vojta¹, Eva Tesařová², Pavel Coufal¹

¹Charles University in Prague, Faculty of Science, Department of Analytical Chemistry, Albertov 6, 128 43 Prague 2, Czech Republic

²Charles University in Prague, Faculty of Science, Department of Physical and Macromolecular Chemistry, Albertov 6, 128 43 Prague 2, Czech Republic

Most publications consider methacrylic acid (MAA) as a charge-bearing monomer for generation of electroosmotic flow in capillary electrochromatography [1,2]. However, incorporation of this polar compound can markedly affect the properties of the monolithic support in general [3].

In this study, negatively charged monoliths with methacrylic acid, styrene and divinylbenzene as monomers has been prepared in a single step and

then used as a separation media for capillary liquid chromatography (CLC) of neutral and ion molecules. In order to optimize the CLC separation, series of polystyrene-based monolithic columns prepared by different polymerization conditions, such as different monomer content, polymerization temperature and time of polymerization were examined. The effect of the mobile phase composition and pH on separation performance was investigated. Column permeability, retention factors, peak asymmetry factors, height equivalents to a theoretical plate and peak resolution were used for characterization of prepared columns. Furthermore, the influence of polymerization mixture composition on the morphology of poly(styrene-divinylbenzene-methacrylic acid) monoliths was systematically studied with mercury intrusion porosimetry (MIP) and BET nitrogen absorption method.

The projects No. 710 and SVV 261204 of the Grant Agency of the Charles University and Research Projects MSM 0021620857 and RP 14/63 of the Ministry of Education, Youth and Sports are highly acknowledged for the financial support.

- [1] Jin W. H.; Fu H. J.; Huang X. D.; Xiao H.; Zou H. F.: *Electrophoresis* 2003, 24, 3172–3180.
 [2] Huang H-Y; Huang I-Y; Lin H. Y.: *J. Sep Sci.* 2006, 29, 2038–2048.
 [3] Svobodova A.; Krizek T.; Sirc J.; Salek P.; Tesarova E.; Coufal P.; Stulik K.: *J. Chromatogr.* 2011, 1218, 1544–1547.

1Po55

SORPCE KOVŮ NA UHLÍKATÝCH AEROGELECH DOPOVANÝCH KOVY

Vít Šebesta¹, Václav Slovák¹,

¹*Ostravská univerzita v Ostravě, Přírodovědecká fakulta, 30. dubna 22, 701 03, Ostrava, dr.regent@seznam.cz*

Cílem práce bylo potvrzení domněnky [1], že přítomnost iontů kovů v polykondenzační fázi přípravy uhlíkatých aerogelů pozitivně ovlivňuje sorpci použitého kovu na výsledný uhlíkatý aerogel. Sorpční experimenty (sorpce zinečnatých a měďnatých iontů, dávkové uspořádání) byly provedeny na dvou sériích (A a B) uhlíkatých aerogelů připravených upraveným postupem [2] lišících se použitým kondenzačním katalyzátorem (v sérii A pouze dusičnan kovu, v sérii B přidána HNO₃), ve fázi polykondenzace byly přidány Zn²⁺ resp. Cu²⁺ soli.

Výsledky ukázaly, že sorpce sledovaných iontů na připravené sorbenty je velmi nízká (max. 0,03 mmol g⁻¹). Přítomnost iontů Zn²⁺ při přípravě aerogelů navíc způsobuje další snížení sorpční kapacity pro sorpci zinečnatých iontů. Naopak, pro sorpci Cu²⁺ jsou takto připravené sorbenty série B účinnější než sorbenty připravené bez přítomnosti Zn²⁺. Aplikace Cu²⁺ iontů při přípravě aerogelů snižuje jejich sorpční kapacitu v sérii A pro oba sledované ionty kovů. V sérii B ovšem vede k výraznému zvýšení sorpce Cu²⁺ iontů, sorpci zinečnatých iontů neovlivňuje.

Lze tedy shrnout, že použití zinečnatých a měďnatých iontů při přípravě uhlíkatých aerogelů sice má v některých případech pozitivní vliv na jejich schopnost sorbovat tyto ionty z vodných roztoků, ovšem tento vliv není jednoznačný a aplikace iontů kovů může vést i ke snížení sorpční kapacity.

Tato práce vznikla v rámci projektu Institut environmentálních technologií, reg. č. CZ.1.05/2.1.00/03.0100 podporovaného Operačním programem Výzkum a vývoj pro Inovace, financovaného ze strukturálních fondů EU a ze státního rozpočtu ČR.

- [1] Slovák V.: Závěrečná zpráva projektu SGS4/PřF/2010. Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita v Ostravě (2010).
 [2] M. Sánchez-Polo, J. Rivera Utrilla, J. Méndez-Díaz, J. López-Peñalver: *Metal Doped Carbon Aerogels: New Materials for Water Treatments*, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 47, (2008), s.6001-6005

1Po56

FS TIME-RESOLVED SPECTROSCOPY OF SOLID FILMS BASED ON OLIGOTHIOPHENE COPOLYMER.

J. Šepelák¹, D. Velič^{1,2}, I. Bugár², G. Čík³, D. Repovský¹

¹*Department of Physical and Theoretical Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Mlynská dolina, Bratislava 842 15, Slovakia, sepelak@fns.uniba.sk*

²*International Laser Center, Ilkovičova 3, Bratislava 812 19, Slovakia*

³*Departement of Environmental Engineering, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, Bratislava 812 37, Slovakia*

A novel type of copolymer of alkylated oligomeric thiophene and polyethylene oxide (PEO) was examined by steady-state and time-resolved fs spectroscopy. [1] The copolymer is soluble in common organic solvents and in the

solid state creates structurally-organized clusters composed of conducting (oligothiophenic) and non-conducting (PEO) segments. [Fig.1]

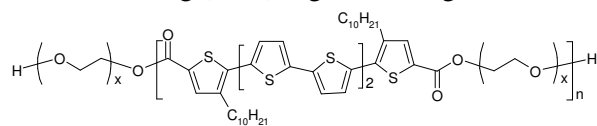


Fig. 1 Copolymer of dimethyl ester of 3,3''''-bisdecyl [2,2'; 5',2''; 5'',2'''; 5''', 2''''; 5''''', 2'''''']sexithiophene-5,5''''''-dicarboxylic acid with polyethylene oxide

The influence of structural order of oligothiophene solution and thin solid films on their optical properties were investigated. Thin films were prepared by drop-casting and spin-coating deposition of oligothiophene in toluene onto SiO₂ glass. Additionally AFM have been used to characterise topographical properties of surface, showing disparities in histograms of solid samples. Time resolved fs fluorescence spectra of solid films excited with 400nm exhibit tendency to split the spectra into two regions from 490-540nm and 560-600nm, where the decay time is 5-15 ps. Intrachain vs. interchain exciton hopping mechanisms are discussed while keeping in mind self-assembling properties of copolymer during the deposition process. [2,3] These results suggest that new doped oligothiophenic copolymers could represent a valid alternative as compared to systems that require control of the molecular orientation.

The work was supported by APVV-0491-07 and meta-QUTE.

- [1] G.. Čík, Z. Végh, F. Šeršeň, J. Krištín, B. Lakatoš, P. Fejdi, Synth. Met. 149 (2005) 31-38
 [2] J. Cornil, J.P. Calbert, D. Beljonne, R. Silbey, J.L. Brédas, Adv. Mater 12 (2000) 978 Plenum Publishers, 1999.
 [3] D. Beljone, G. Puortois, C. Silva, E. Hennebicq, L.M. Herz, R.H. Friend, G.D Scholes, S. Setayesh, K. Müllen, J.L. Bredas, PNAS 99 (2002) 10982

1Po57

DESTILACE SMĚSI MOF₆ – UF₆

Jan Škarohlíd¹

¹Ústav jaderného výzkumu Řež as ,skh@ujv.cz

Základním principem zpracování vyhořelého jaderného paliva je jeho rozseparování na složky vhodné k dalšímu využití (uran, plutonium) a na odstranění vysoce radioaktivních štěpných produktů. Metoda frakční destilace fluoridů (Fluoride Volatility Method) umožňuje oddělit

uran a plutonium ze směsi fluoridů vzniklých po fluoraci paliva. Zatímco uran a plutonium tvoří těkavé hexafluoridy, většina štěpných produktů tvoří reakcí s fluorem netěkavé trifluoridy a může být odstraněna z procesu jako tuhý podíl. Menší část produktů štěpení obsažená ve vyhořelém palivu však reaguje s fluorem podobně jako uran za vzniku těkavých sloučenin, které doprovázejí UF₆ jako nežádoucí příměsí a je nutno je poměrně složitým způsobem oddělit. V Ústavu jaderného výzkumu Řež a na pracovištích oddělení fluorové chemie jsou v současné době studovány možnosti fluorace plyným fluorem [1] a možnosti čištění fluoridu uranového od příměsí těkavých fluoridů metodou vsádkové destilace v náplňové rektifikační koloně [2].

- [1] Uhlíř, J.; Mareček, M.: Fluoride volatility method for reprocessing of LWR and FR fuels, Journal of Fluorine Chemistry, Vol. 130, January 2009, pp. 89 – 93
 [2] Škarohlíd, J.: Návrh rektifikační kolony na UF₆. ČVUT, Praha, 2009.

1Po58

BENZOTHIAZOLOVÉ DERIVÁTY JAKO ÚČINNÉ INHIBITORY ACETYLCHOLINESTERÁZY

Šárka Štěpánková¹, Aleš Imramovský², Markéta Kovářová³

¹ Katedra biologických a biochemických věd, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice

² Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice

³ Katedra fyzikální chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice

Acetylcholinesteráza (ACHE) patří do skupiny enzymů, které štěpí cholinové estery. ACHE odbourává neurotransmitter cholinergního nervového systému - acetylcholin. Zvýšená aktivita ACHE může způsobovat poruchy v přenosu nervových impulsů v cholinergním nervovém systému v důsledku sníženého množství acetylcholinu schopného vazby na cholinergní receptory a je pravděpodobně jednou z příčin rozvoje Alzheimerovy choroby. Standardním přístupem v symptomatické léčbě Alzheimerovy choroby je snaha zvýšit množství acetylcholinu schopného vazby na cholinergní receptory. K tomu se využívají inhibitory cholinesteráz [1,2].

Cílem této práce bylo nalézt vhodný inhibitor acetylcholinesterázy. Jako potenciální inhibitory byly testovány benzothiazolové deriváty. Inhibiční účinnost testovaných látek byla

charakterizovaná hodnotou IC_{50} , ktorá bola stanovená Ellmanovou spektrofotometrickou metódou [3].

Bylo prokázáno, že testované látky jsou účinnými inhibitory acetylcholinesterázy.

Tato práce vznikla za finanční podpory Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR v rámci projektu MSM 0021627502 a MSM0021627501.

- [1] Benzi G., Moretti A.: Is there a rationale for the use of acetylcholinesterase inhibitors in the therapy of Alzheimer's disease. *Eur. J. Pharmacol.*, 346, 1998, 1-13.
- [2] Lahiri D.K., Farlow M.R., Greig N.H., Sambamurti K.: Current Drug Targets for Alzheimer's Disease Treatment. *Drug Develop. Res.*, 56, 2002, 267-281.
- [3] Zdražilová P., Štěpánková Š., Komers K., Ventura K., Čegan A.: Half-inhibition concentrations of new cholinesterase inhibitors. *Z. Naturforsch.*, 59c, 2004, 293-296.

1Po59

DIAGNOSTIKA CHEMICKÝCH INDIKÁTOROV LEUKÉMIE NA POVRCHU MEMBRÁN POMOCOU HMOTNOSTNEJ SPEKTROMETRIE SEKUNDÁRNYCH IÓNOV

Katarína Švihlová¹, Monika Stupavská¹, Tatiana Kurucová³, Zdenka Sulová³, Monika Jerigová², Dušan Velič²

¹Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, Slovenská republika; ursonka@gmail.com

²Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava, Slovenská republika; ilc@ilc.sk

³Ústav molekulárnej fyziológie a genetiky SAV, Vlárská 5, 833 34 Bratislava, Slovenská republika; tatiana.kurucova@savba.sk

Leukémia je nádorové ochorenie krvotvorby. Nepatrí medzi najbežnejšie civilizačné ochorenia, ale prejavuje sa značným stupňom zhubnosti, najmä jej akútnych foriem. Priebeh rakoviny ako aj odozvu na prípadnú aplikáciu liečiv sprevádzajú chemické zmeny na povrchu biologickej membrány. Tieto biologicko-chemické prejavy môžeme pozorovať metódou SIMS („Secondary Ion Mass Spectrometry“ - hmotnostná spektrometria sekundárnych iónov).

Analyzovala sa myšia leukemická línia L1210 a jej biochemické prejavy. Podrobnejšie sa skúmali senzitivné bunky, ktoré sú citlivé na liečivo a rezistentné bunky. Rezistencia bola u nich vyvinutá adaptáciou na liečivo vinkristín [1].

SIMS analýza potvrdila, že priebeh rakoviny sprevádzajú biochemické prejavy na povrchu biologickej membrány, ktoré možno diagnostikovať.

Zamerali sme sa na sekundárne ióny aminokyselín a derivátov fosfatidylcholínu. Pozorovali sme najmä prolín, valín, arginín, histidín a asparagín, ktoré vykazovali rozdielne intenzity medzi senzitivnými a rezistentnými bunkami. Boli pozorované aj významné rozdiely v intenzitách sekundárnych iónov fosfatidylcholínu medzi senzitivnými a rezistentnými bunkami. Intenzity sekundárnych iónov derivátov fosfatidylcholínu boli pri rezistentných bunkách signifikantne vyššie ako pri senzitivných bunkách. Taktiež sme pozorovali aj výskyt sekundárnych iónov iných aminokyselín a cholesterolu, ale ich intenzity neboli tak rozdielne.

Pomocou metódy SIMS sme schopní jednoducho analyzovať povrchy biologických vzoriek, čo umožňuje priamu diagnostiku tkanivových kultúr z hľadiska ich reakcie na dané liečivo.

Táto práca bola vytvorená realizáciou projektu „meta-QUTE: Centrum excelentnosti kvantových technológií“, na základe podpory operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja a tiež grantu APVV-0491-07.

[1] Tatiana Kurucová: Zmeny v expresii povrchových sacharidov sprevádzajúce expresiu P-glykoproteínu v myšej leukemickej línii L1210; Písomná práca k doktorandskej skúške, Ústav molekulárnej fyziológie a genetiky, Slovenská akadémia vied; 2010

1Po60

VOLTAMMETRIC DETERMINATION OF CAFFEINE USING A BORON-DOPED DIAMOND ELECTRODE

Ľubomír Švorc¹, Miroslav Rievaj¹, Peter Tomčík², Dušan Bustin¹

¹Ústav analytickej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, lubomir.svorc@stuba.sk

²Katedra chémie, Pedagogická fakulta, Katolícka univerzita v Ružomberku, Hrabovská cesta 1, 034 01 Ružomberok

Caffeine is an alkaloid N-methyl derivative of xanthine widely distributed in natural products, commonly used in beverages with many physiological effects, such as gastric acid secretion, diuresis, and stimulation of the central

nervous system [1]. Thus, various methods for analyzing caffeine have been developed, including spectrophotometric and chromatographic ones [2]. These methods are generally more expensive time-consuming, and complicated than electroanalytical ones. In spite of this, electroanalytical methods have rarely been used for the analysis of caffeine, mainly because its oxidation occurs at a very positive potential.

The use of boron-doped diamond as an electrode substrate is now well established, mainly due to properties such as a wide potential window in aqueous solutions, low background currents, long term stability, and low sensitivity to dissolved oxygen [3].

In this paper we describe the use of a cathodically pre-treated BDD electrode for the selective and sensitive determination of caffeine (using pulse techniques). The proposed electroanalytical method has the advantages of being considerably less time-consuming and less expensive than other analytical methods that also apply to the determination of this substance, especially HPLC.

Autori ďakujú Vedeckej grantovej agentúre Ministerstva školstva, vedy, výskumu a športu SR a Slovenskej akadémie vied (VEGA č. 1/0066/09) za finančnú podporu.

N. Spätaru, B.V. Sarada, D.A. Tryk, A. Fujishima: *Electroanalysis* 14, 721 (2002)

R.L. Evans, P.H. Siitonen: *J. Chromatogr. Sci.* 46, 61 (2008)

Y.V. Pleskov: *Russ. J. Electrochem.* 38, 1275 (2002)

1Po61

FLUORESCENČNÁ SPEKTROSKOPIA SUPRAMOLEKULOVÝCH KOMPLEXOV KUMARÍNU C153 A CYKLODEXTRÍNOVÝCH DERIVÁTOV

Marianna Trenčanová¹, Dušan Velič¹,

¹ *Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina, Bratislava, 84545, Slovenská republika*

Cieľom práce bolo zistiť, či modifikácia β -cyklodextrínu (CD) vo forme heptakis (6-O-t-butyl-dimetylsilyl-2,3-di-O-acetyl)- β -cyklodextrín triviálne nazvaný silylovaný β -cyklodextrín (SCD) alebo 6-deoxy-6-monothio- β -cyklodextrín triviálne nazvaný tiolovaný β -cyklodextrín (TCD), ovplyvní tvorbu supramolekulových komplexov medzi kumarínom C153 a cyklodextrínmi.[1] Tento vplyv je prezentovaný fluorescenčnými spektrami. Motiváciou je

z daných CD vytvoriť povrchové supramolekulové štruktúry. C153 je organická látka so schopnosťou fluorescencie v dôsledku konjugovaných násobných väzieb a pevného skeletu molekuly.[2] CD je sacharid zložený zo 7 glukopyranózových jednotiek, je kužeľovitého tvaru s hydrofilným povrchom molekuly a hydrofóbnou kavitou.[3]

Fluorescencia C153 bola meraná vo vodných roztokoch troch cyklodextrínov a následne bol vypočítaný Stokesov posun pre jednotlivé supramolekuly. CD 5005 cm^{-1} , SCD 4685 cm^{-1} a klesá v závislosti od narastajúcej koncentrácie. TCD 5507 cm^{-1} a stúpa v závislosti od narastajúcej koncentrácie. Dynamické fluorescenčné spektrá boli merané vo vodnom roztoku C153 s relaxačnými časmi τ_1 v intervale 3-6 ps, τ_2 172-200 ps, τ_1 8,3-9 ps, τ_2 od 152-185 ps pre systém C153/SCD vo vode a τ_1 0, 58-1,28 ps, τ_2 147-200 ps pre systém C153/TCD vo vode. Namerali sme aj elektorchemický zeta potenciál sklenenej podložky pri pH 3,6 a sklenenej podložky pripravenej v substráte silylovaného CD pri pH 3,48.

Rozdiely v maximách vlnových dĺžok, časy aj zeta potenciál jasne dokumentujú rôzne solvatačné podmienky pre C153 v závislosti od modifikácie cyklodextrínu.

Táto práca bola podporená realizáciou projektu „meta-QUTE: Centrum excelentnosti kvantových technológií“, na základe podpory operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja a tiež grantu APVV-0491-07.

Velič, D. Köhler, G. *Chemical Physics Letters*, 2003, 371, 3-4, p. 483

Lakowicz, R.J. *Principles of fluorescence spectroscopy* 1999,

Douhal, A. *Cyclodextrin Materials Photochemistry, Photophysics and Photobiology*, 2006

1Po62

EXPLODAT-DATABÁZE VOJENSKÝCH, CIVILNÍCH VÝBUŠNIN A CHEMICKÝCH LÁTEK POUŽITELNÝCH JAKO IMPROVIZOVANÉ VÝBUŠNINY

prof. Ing. Karel Ventura, Csc., Martin Šoška, Bc., Libor Bohdanec, Bc.

Projekt je orientovaný na vytvorenie novej elektronickej databázy vojenských, civilných výbušnín a chemických látok použiteľných ako improvizované výbušniny. Databáza bude obsahovať kľúčová data pro rozpoznávaní,

základní analýzu a manipulaci s výbušninami a látkami, které mají povahu výbušnin včetně jejich směsí. Základními daty jsou chemické, fyzikální a výbušnářské vlastnosti výše uvedených látek, data toxikologická a ekotoxikologická, a dále potom data pro rozpoznání a základní analýzu výbušnin jako jsou senzorické testy, barevné reakce výbušnin, (analýza pomocí komerčně dodávaných setů), tenkovrstvé chromatografie TLC, Ramanových spekter jednotlivých výbušnin, včetně směsí. Databázi lze použít pro identifikaci a analýzu výbušnin a jejich směsí, pro zabezpečení bezpečnosti a ochrany zdraví při práci s výbušninami, při bojových misích, při nálezech nástražných výbušných systémů případně zabezpečení prostorů kde byly tyto NVS vyráběny a v neposlední řadě pro výcvik a školení specialistů pro práci s výbušninami. Systém bude poskytovat důležité informace pro rozhodovací procesy.

1Po63

ŠTÚDIUM CHIRÁLNYCH HPLC SEPARÁCIÍ FEROELEKTRICKÝCH KVAPALNÝCH KRYŠTÁLOV A ICH PREKURZOROV

Terézia Vojtylová^{1,2}, David Sýkora², Věra Hamplová¹

¹Fyzikální ústav AV ČR, v. v. i., Na Slovance 2, 182 21 Praha 8, ČR, vojtyl@fzu.cz

²Ústav analytické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, ČR

Kvapalné kryštály, ktoré sú definované ako molekulárne elektronické materiály, nachádzajú v súčasnosti uplatnenie nielen v zobrazovacej technike, ale už aj ako termické, chemické, či elektronické senzory. Feroelektrické kvapalné kryštály, ktoré vznikajú z kyseliny mliečnej, obsahujú chirálnu časť s jedným alebo viacerými asymetrickými uhlíkovými atómami, čo vedie k existencii enantiomérov či diastereomérov. Kontrola optickej čistoty týchto látok je veľmi dôležitá, pretože aj malý obsah druhého (znečisťujúceho) diastereoméru môže často viesť k zmene kvapalno-kryštalického chovania materiálu [1]. Chirálna HPLC separácie tohto druhu kvapalných kryštálov sú komplikované a nepreštudované aj vďaka komplikovanej štruktúre molekúl kvapalného kryštálu.

Vybrané kvapalné kryštály a ich prekurzory boli podrobené separáciám na chirálnych kolónach rôznych výrobcov. Pre ďalšie experimenty a

optimalizáciu separačných metód sa zvolila kolóna, ktorá bola založená na amylozou modifikovanom silikagéli. Optimalizované bolo najmä zloženie mobilnej fázy (MF), prídavok modifikátorov v MF a teplota pri separácii, tak aby bolo dosiahnutého čo najlepšieho delenia zmesí enantiomérov.

V prípade polárneho organického separačného módu sa nepodarilo dosiahnuť úplného delenia zmesi enantiomérov ani za postupného znižovania teploty a prídavkov modifikátorov. Rozlíšenie separovaných enantiomérov klesalo so znižovaním teploty. Zlepšenie separácií bolo pozorované v prípade normálneho separačného módu dokonca aj pri priestorovo najzložitejšom kvapalnom kryštáli.

Práca vznikla za finančnej podpory grantu GAČR P204/11/0723 a projektu MSM 6046137307.

[1] T. Isozaki, H. Takezoe, A. Fukuda, Y. Suzuki, and I. Kawamura, *J. Mater. Chem.* **4**, 237 (1994)

1Po64

HPLC STANOVENÍ NITROSLOUČENIN POMOCI PRŮTOKOVÉHO DETEKTORU ZE STŘÍBRNÉHO PEVNÉHO AMALGÁMU

Oksana Yosypchuk¹, Jiří Barek¹, Bogdan Yosypchuk²

¹Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO Laboratoř elektrochemie životního prostředí, Albertov 6, 128 43 Praha 2, oksana.yosypchuk@seznam.cz

²Ústav fyzikální chemie Jaroslava Heyrovského AV ČR, v.v.i., Dolejškova 3, 182 23 Praha 8, Česká republika

Amperometrická detekce se už dlouhou dobu úspěšně používá ve spojení se separačními technikami jako jsou HPLC, FIA nebo CZE. Pro tyto účely již existuje celá řada technických řešení pro měřicí cely a to např. tubulární, mikrocyklrické, thin-layer nebo wall-jet. Elektrodové materiály využívané pro tabulární uspořádání jsou hlavně na bázi zlata a platiny. Např. Santos a kol. [1] navrhli zlatý tubulární detektor pro stanovení antimonu, Cvačka [2] a Li [3] popsali využití platinového tubulárního detektoru v kombinaci s HPLC pro stanovení 1-aminonaftalenu a nitrofenolů.

V tomto příspěvku je věnována pozornost využití nového, doposud nepublikovaného typu průtokového tubulárního amperometrického detektoru na bázi stříbrného pevného amalgámu (TAD-AgSA). Výhodou stříbrného pevného

amalgámu je především široký potenciálový rozsah v negatívnej oblasti (do ~ -1800 mV), což umožňuje detekci sloučenin redukujících se při vysokých negativních potenciálech. TAD-AgSA ve spojení s HPLC systémem byl využit pro stanovení směsi nitrosloúčenin (2-nitrofenol, 4-nitrofenol a 2,4-dinitrofenol) v modelovém vzorku. Optimalizace metody zahrnovala nalezení vhodné mobilní fáze, potenciálu detekce, průtokové rychlosti a dávkovaného objemu. TAD-AgSA vykazoval dobrou opakovatelnost a dostatečnou citlivost. Zatímco tabulární detektory z často používaných materiálů jako jsou Au a Pt umožňují detekci hlavně oxidujících se analytů, navržený TAD-AgSA přináší široké možnosti pro detekci na základě redukce.

Tato práce byla finančně podporována Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy (projekty MSM 0021620857, LC 06035, LC 06063, RP 14/63), GAČR (projekt P206/11/1638), KONTAKT (AMVIS) projekt ME 10004 (NEMVAD), GAUK (project 282111/2001/B-Ch/PrF) a projektem SVV 2011–263204.

- [1] Santos J. R., Lima J. L. F. C., Quinaz M. B., Rodriguez J. A., Barrado E.: *Electroanalysis* 19, 723 (2007).
 [2] Cvačka J., Opekar F., Berek J., Zima J.: *Electroanalysis* 12, 39 (2000).
 [3] Li T., Coufal P., Opekar F., Štulík K., Wang E.: *Anal. Chim. Acta* 360, 53 (1998).

1Po65

APLIKACE EX SITU VOLTAMETRICKÝCH METOD PRO STUDIUM ANTIOXIDAČNÍCH A PROOXIDAČNÍCH VLASTNOSTÍ FLAVONOLIGNANŮ A ANALÝZU JEJICH INTERAKCÍ S DNA

Martina Zatloukalová¹, Vladimír Křen², Radek Gažák², Martin Kubala³, Jitka Ulrichová¹, Jan Vacek¹

¹Ústav lékařské chemie a biochemie, Lékařská fakulta, Univerzita Palackého, Hněvotínská 3, CZ-775 15 Olomouc, Česká republika

²Mikrobiologický ústav, Akademie věd České republiky, Vídeňská 1083, CZ-142 20 Praha, Česká republika

³Katedra biofyziky, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, Česká republika

Flavonoidy jsou přirozeně se vyskytující látky, hojně zastoupené v potravě, jejichž příjem u člověka činí přibližně 1 g/den [1]. Tyto látky vynikají biologickými účinky, především

antibakteriálními a protizánětlivými, vyplývající z jejich antioxidačních a chelatačních vlastností [1-3]. Naším cílem bylo studium flavonolignanu silybinu (Schéma I), jeho derivátů (2,3-dehydrosilybinu, 7-O-methylsilybinu, 20-O-methylsilybinu) a isosilybinu pomocí elektrochemických metod.

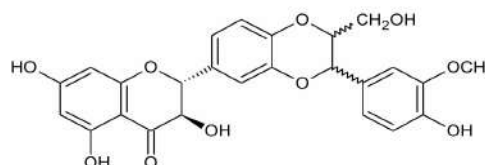


Schéma I. Struktura silybinu

Elektrooxidace látek byla studována pomocí *ex situ* cyklické voltametrie (CV) a voltametrie s vkládaným pravouhlým napětím (SWV) na povrchu pyrolytické grafitové elektrody. Naměřené hodnoty potenciálů oxidace ukazují, že studované flavonolignany jsou slabé antioxidyanty kromě 2,3-dehydrosilybinu, jehož potenciál oxidace (E_p +0,36 V) je srovnatelný s potenciály oxidace flavonoidů, které považujeme za účinné antioxidyanty.

Dále byly studovány interakce flavonolignanů s ionty kovů (Cu^{2+} , Fe^{3+} , Ni^{2+} , Zn^{2+}), které mohou ovlivňovat jejich antioxidační kapacitu. Ionty kovů interagují s hydroxylovými skupinami polyfenolů, což vede k tvorbě reaktivních komplexů. Tyto komplexy mohou přímo interagovat s DNA, popřípadě ji nepřímou poškozovat produkcí volných radikálů Fentonovou reakcí [2]. Nejsilnější interakce byla pozorována mezi Cu^{2+} a silybinem. Molární poměr pro komplex silybin:Cu je 2:1, stechiometrie byla potvrzena SWV a fluorescenční spektrometrií. Získané výsledky přinášejí nové poznatky o prooxidačních vlastnostech flavonolignanů a jejich komplexů s mědí a mohou být využity k objasnění jejich reaktivity v organismu.

Práce byla financována Grantovou agenturou ČR (P503/11/P312, P301/11/0767, 303/09/HO48) a Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy ČR (MSM 6198959216, AV0Z50200510).

- [1] J. Vacek, J. Ulrichová, B. Klejdus, V. Šimánek: Analytical methods and strategies in the study of plant polyphenolics in clinical samples *Anal. Methods*, 2 (2010) 604-613
 [2] S. Quideau, D. Deffieux, C. Douat-Casassus, L. Pouysegou: Plant polyphenols: chemical properties, biological activities, and synthesis, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 50 (2011) 586-621

[3] R. Gažák, D. Walterová, V. Křen: Silybin and silymarin - New and emerging applications in medicine, *Curr. Med. Chem.*, 14 (2007) 315-338

1Po66

**AMPÉROMETRICKÁ DETEKCE
GENOTOXICKÝCH AMINODERIVÁTŮ
POLYCYKLICKÝCH AROMATICKÝCH
UHLOVODÍKŮ V HPLC S VYUŽITÍM
PLATINOVÉHO
MIKROCYLINDRICKÉHO DETEKTORU**

Jaroslava Zavázalová¹, Hana Dejmková¹, Jiří Barek¹, Šárka Ramešová¹, Karolina Pecková¹

¹Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Albertov 6, 128 43 Praha 2, zavazal1@natur.cuni.cz

Tato práce se zabývá možností elektrochemické detekce (ED) genotoxických aminoderivátů polycyklických aromatických uhlovodíků, konkrétně 2-aminobifenyly, 4-aminobifenyly, 1-aminonafthalenu a 2-aminonafthalenu, v HPLC. Platinová mikrocyklindrická elektroda byla použita jako pracovní elektroda ampérometrického detektoru [1]. Byly optimalizovány detekční podmínky, změřeny kalibrační závislosti a určeny meze stanovitelnosti: $1,4 \cdot 10^{-6}$ mol dm⁻³ pro 2-aminobifenyl, $8,5 \cdot 10^{-7}$ mol dm⁻³ pro 4-aminobifenyl, $3,8 \cdot 10^{-7}$ mol dm⁻³ pro 1-aminonafthalen a $4,8 \cdot 10^{-7}$ mol dm⁻³ pro 2-aminonafthalen. Pracovní charakteristiky ampérometrického detektoru s platinovou mikrocyklindrickou elektrodou byly na příkladu 2-aminonafthalenu porovnány s ampérometrickým detektorem s platinovou tubulární elektrodou [2]. Ten je výhodnější z hlediska citlivosti detekce a meze stanovitelnosti, zatímco platinový mikrocyklindrický detektor z hlediska účinnosti separace. Platinový mikrocyklindrický detektor byl dále použit pro HPLC-ED stanovení výše uvedených analytů v moči s využitím předběžné separace a prekoncentrace pomocí extrakce na tuhé fázi.

Tato práce byla finančně podporována Grantovou agenturou Univerzity Karlovy v Praze (projekt GAUK 92010), Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (projekt LC 06035, MSM 0021620857 a RP 14/63) a projektem SVV 2011-263204.

[4] Karolina Pecková, Veronika Mocko, František Opekar, Greg M. Swain, Jiří Zima, Jiří Barek: *Chemické Listy*, 100, 124 (2006)

[5] Josef Cvačka, František Opekar, Jiří Barek, Jiří Zima: *Electroanalysis* 12, 39 (2000)

1Po67

**ANALÝZA JÍLOVÝCH MINERÁLŮ
S VYSOKÝM OBSAHEM STŘÍBRA
METODOU RENTGENOVÉ
FLUORESCENČNÍ SPEKTROMETRIE**

Jana Zdrálková¹, Vladimír Tomášek¹

¹Centrum nanotechnologií, VŠB-Technická univerzita Ostrava, 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava
vladimir.tomasek@vsb.cz

Tato práce se zabývá vývojem metody pro stanovení stříbra v kompozitních materiálech na bázi jílových minerálů (vermikulit a montmorillonit) interkalovaných stříbrem. Jílové minerály zde slouží jako matrice pro tvorbu nanočástic stříbra, které vykazují silné baktericidní účinky. Takto modifikované jílové minerály lze použít jako antibakteriální plniva do polymerů, stavebních nebo sanitárních hmot. K charakterizaci těchto materiálů je nezbytné, vedle stanovení stříbra, také stanovení základních, případně dalších doprovodných prvků. Pro daný účel je vhodná metoda rentgenové fluorescenční spektrometrie (XRF), která umožňuje simultánní stanovení všech požadovaných prvků bez nutnosti převádění vzorku do roztoku. Problémem je neexistence certifikovaných referenčních materiálů jílových minerálů s tak vysokým obsahem Ag (až 10 % hmot.) vhodných pro kalibraci rentgenového spektrometru. Předpokladem pro využití metody XRF k danému účelu je tedy příprava vlastních referenčních materiálů požadovaného složení. Byla použita metoda tavenin vzorků s tetraboritanem lithným. Byly připraveny taveniny směsi vermikulitu a montmorillonitu známého složení s přísadkou Ag₂O v očekávaném rozsahu koncentrací Ag (0,2 – 7 % hmot.). Byla ověřena homogenita připravených perel a opakovatelnost jejich přípravy, dosažené parametry byly pro daný účel vyhovující. Takto připravené vzorky byly použity pro sestavení kalibrační závislosti. Správnost výsledků stanovení Ag byla ověřena analýzou připravených referenčních materiálů novou metodou.

Práce vznikla za podpory výzkumného záměru č. MSM 6198910016

1Po68**ANALÝZA METABOLITOV VO
VÝDYCHOVÝCH PLYNOCH ČLOVEKA
S VYUŽITÍM MIKROEXTRAKČNEJ
TECHNIKY INCAT**

Gabriela Addová¹, Peter Podolec¹, Alexandra Szabóová¹, Róbert Kubinec¹, Ivan Ostrovský¹, Jaroslav Blaško¹, Renáta Górová¹, Ladislav Soják¹, Janka Kubincová¹, Jozef Višňovský¹, Anton Amann², Viktor G. Berezkin³

¹*Institute of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University in Bratislava, Slovakia, addova@fns.uniba.sk*

²*Breath Research Unit, Austrian Academy of Sciences, Innsbruck, Austria*

³*A.V. Topchiev Institute of Petrochemical Synthesis, Russian Academy of Science, Moscow, Russia*

Výdych človeka obsahuje veľké množstvo prchavých organických zlúčenín v stopových koncentráciách. Analýza týchto zlúčenín prítomných vo výdychu nám môže poslúžiť ako náhľad do rôznych biochemických procesov zdravého aj chorého tela. Analýza výdychových plynov je jedna z neinvazívnych diagnostických metód. Ako klinický nástroj vyžaduje spoľahlivú identifikáciu a kvantifikáciu zložiek, prítomných v koncentráciách ppb - ppt, pričom je potrebné poznať biochemické mechanizmy, ktorými sa tieto látky v tele vytvárajú. Príprava vzoriek predstavuje najkritickejší krok analýzy. V súčasnosti je snaha o redukciu objemu použitých rozpúšťadiel a minimalizáciu predúpravnych krokov analýzy. V posledných rokoch sa vyvinulo viacero bezrozpúšťadlových techník na analýzu prchavých organických zlúčenín. Technika INCAT (inside needle capillary adsorption trap) umožňuje analýzu rôznych prchavých zlúčenín prítomných vo vzorkách na stopovej úrovni. Okrem toho, že ide o bezrozpúšťadlovú, jedнокrokovú metódu predúpravy vzoriek, ďalšími výhodami sú robustnosť zariadenia, možnosť vzorkovania priamo v teréne a možnosť použitia na ľubovoľnom komerčne dostupnom plynovom chromatografe.

Prácu podporila Agentúra Ministerstva školstva, vedy, výskumu a športu Slovenskej republiky pre štrukturálne fondy EÚ pod číslom projektu ITMS 26240220007 a Agentúra na podporu výskumu a vývoja pod číslom projektu APVV-0416-10.

1Po69**ANALÝZA MONO- A DISACHARIDOV
A ICH METABOLITOV V MOČI
METÓDOU GC-MS**

Gabriela Addová¹, Ivan Ostrovský¹, Róbert Kubinec¹, Jaroslav Blaško¹, Renáta Górová¹, Peter Podolec¹, Jozef Višňovský¹, Alexandra Szabóová¹

¹*Institute of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University in Bratislava, Slovakia, addova@fns.uniba.sk*

Dedičné metabolické poruchy (DMP) sú genetické poruchy spôsobené deficitom aktivity enzýmu. Niektoré DMP sú liečiteľné špeciálnymi diétami, iné spôsobujú vážne ochorenie a dokonca aj smrť. Väčšina dedičných porúch metabolizmu sa monitoruje rutinným rozborom krvi alebo moču. Galaktozémia je metabolická porucha, ktorá sa spája s intoleranciou galaktózy v strave v dôsledku dedičnej enzymatickej nedostatočnosti. Prejavuje sa prítomnosťou zvýšenej hladiny galaktózy a galaktitolu v moči. Plynová chromatografia (GC) v spojení s hmotnostnospektrometrickou detekciou (MS) sa použila pre svoju schopnosť sledovať uhl'ovodíky v moči, predovšetkým galaktózu a galaktitol. Opísaná metóda používa trimetylsilylové deriváty galaktitolu a galaktózy a na jednu analýzu je potrebných 100 µl moču. Vzorky moču sa získali od 25 zdravých jedincov (zaradených do 5 vekových skupín) a od 4 pacientov liečených na klasickú galaktozémiu. Uvedenou metódou sa zistila veková závislosť vylučovania galaktózy a galaktitolu v moči u zdravých subjektov a pacientov liečených na galaktozémiu. Na základe potreby súčasného merania galaktitolu a galaktózy v moči pacientov trpiacich galaktozémiou v klinickej praxi sme vyvinuli novú GC/MS metódu, prvýkrát umožňujúcu meranie vzoriek moču správnym, presným jedнокrokovým postupom. Táto metóda nevyžaduje predúpravu moču pred silyláciou.

Prácu podporila Agentúra Ministerstva školstva, vedy, výskumu a športu Slovenskej republiky pre štrukturálne fondy EÚ pod číslom projektu ITMS 26240220007 a Agentúra na podporu výskumu a vývoja pod číslom projektu APVV-0416-10.

1Po70**SEPARÁCIA A IDENTIFIKÁCIA
MONONITRO- A DINITRO- IZOMÉROV
N,N-DIMETYLDIFENYLACETAMIDU**

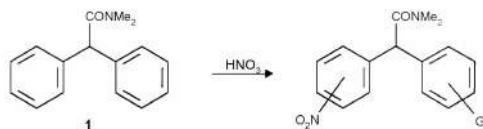
Jaroslav Blaško¹, Peter Podolec¹, Róbert Kubinec¹, Ivan Ostrovský¹, Gabriela Addová¹, Renáta Górová¹, Ladislav Soják¹, Janka Kubincová¹, Jozef Višňovský¹, Alexandra Szabóová¹, Wilhelm Lorenz²

¹*Institute of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University in Bratislava, Slovakia, blasko@fns.uniba.sk*

²*Department of Chemistry, Institute of Analytical and Environmental Chemistry, Martin-Luther University, Halle-Wittenberg, Germany*

Významnú skupinu organických látok s biologickým účinkom tvoria rezíduá pesticídov. N,N-dimetyldifenylacetamid patrí do skupiny herbicídov. Nitroskupina svojim záporným indukčným *-I* a mezomérym *-M* efektom ovplyvňuje charakter iných funkčných skupín na aromatickom jadre, najmä ak sa nachádzajú v polohe *ortho*- alebo *para*- vzhľadom na nitroskupinu.. Súčasný výskum v oblasti syntézy nitroderivátov aromatických zlúčenín sa zameriava na vývoj nových experimentálne prijateľnejších procesov, na zamedzenie tvorby vedľajších produktov, ako aj na dosiahnutie lepšej selektivity pri získaní produktov.

Na základe známych skutočností sledoval sa vplyv substituovanej amidovej skupiny pri nitrácii. Ako východisková látka nitrácie sa preto použil N, N-dimetyldifenylacetamid **1**. Osobitná pozornosť sa venuje problému analýzy vzniknutých nitračných produktov, t.j. mononitro-**2-4** a dinitro- izomérych zlúčenín **5-10** zobrazených na obrázku. Na identifikáciu mononitro- a dinitro- izomérov ako produktov nitrácie N,N-dimetyldifenylacetamidu **1** sa využilo spojenie techník cGC-FT-IR-MS.



G = H 2 *ortho*-, 3 *meta*-, 4 *para*-
G = NO₂ 5 *ortho,ortho'*-, 6 *ortho,meta'*-, 7 *ortho,para'*-, 8 *meta,meta'*-, 9 *meta,para'*-,
10 *para,para'*-

Obr. Nitračné produkty N,N-dimetyldifenylacetamidu po nitrácii kyselinou dusičnou.

Prácu podporila Agentúra Ministerstva školstva, vedy, výskumu a športu Slovenskej republiky pre štrukturálne fondy EÚ pod číslom projektu ITMS 26240220007 a Agentúra na podporu výskumu

a vývoja pod číslom projektu APVV-0416-10. Práca vznikla v rámci projektu Slovensko-nemeckej spolupráce: „Analytik organischer Inhaltsstoffe in Umwelt-, Lebensmittel- und klinischer Proben mittels kombinierter gaschromatographisch-spektrometrischer Methoden“.

1Po71**STANOVENIE SUMY FTALÁTOV A ICH
METABOLITOV V TUKOVÝCH
MATRICIACH METÓDOU GC-FID**

Jaroslav Blaško¹, Peter Podolec¹, Róbert Kubinec¹, Ivan Ostrovský¹, Gabriela Addová¹, Renáta Górová¹, Ladislav Soják¹, Janka Kubincová¹, Jozef Višňovský¹, Alexandra Szabóová¹, Radomír Čabala²

¹*Institute of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University in Bratislava, Slovakia, blasko@fns.uniba.sk*

²*Charles University in Prague, Faculty of Science, Department of Analytical Chemistry, Czech Republic*

V potravinách sú okrem živín prítomné látky, ktoré majú negatívny vplyv na výživu a zdravie človeka, dokonca sú toxické. Patrí medzi ne aj skupina esterov kyseliny ftalovej tzv. ftaláty (PHTs).

Legislatíva ani monitoring potravín pre obsah PHTs nezabezpečujú deklarovanú bezpečnosť potravín pre spotrebiteľov. Kontrola obsahu PHTs v potravinách je nedostatočná a zameriava sa len na kontrolu obsahu niektorých vybraných PHTs. Samotná chemická analýza jednotlivých PHTs v potravinách, resp. ich toxikologické zhodnotenie sú často problematické a obtiažne

Analytická metóda, ktorá by umožňovala stanoviť obsah všetkých 57 PHTs, ktoré boli doteraz vyrobené, alebo aspoň niekoľko ich hlavných zložiek, by bola inštrumentálne veľmi komplikovaná, prácna a drahá. Z tohto problému vyplýva potreba vhodne upraviť analytický postup tak, aby bolo možné analyzovať ftaláty v jednom behu.

Vyvinuli sme metódu na stanovenie celkového obsahu ftalátov po ich konverzii na dimetyléster kyseliny ftalovej. Metóda je založená na alkalickéj hydrolyze prítomných ftalátov na kyselinu ftalovú pri 80 °C počas 20 hodín, následnom odstránení lipofilných interferentov z okysleného roztoku hydrolyzátu na pH 1 extrakciou do hexánu. Kyselina ftalová je derivatizovaná diazometánom na dimetyl ftalát (DMP) v dvojfázovom systéme voda-chloroform a stanovená GC-FID. Metódou boli analyzované reálne vzorky baltického sled'a a tresky, masla,

bravčového mäsa, tuku z husi a kačice, slnečnicového, olivového a ľanového oleja. Celkový obsah ftalátov v predupravených vzorkách bol v rozsahu od nedetekovanej hodnoty v kačacom tuku až po hodnotu 12,5 (64,3) mgL⁻¹ (nmol.g⁻¹) v masle.

Prácu podporila Agentúra Ministerstva školstva, vedy, výskumu a športu Slovenskej republiky pre štrukturálne fondy EÚ pod číslom projektu ITMS 26240220007 a Agentúra na podporu výskumu a vývoja pod číslom projektu APVV-0416-10.

1Po72

STANOVENIE SEVOFLURÁNU A METABOLITU HEXAFLUÓRIZOPROPANOLU METÓDOU GC-TANDEM MS

Peter Podolec¹, Jaroslav Blaško¹, Gabriela Addová¹, Ivan Ostrovský¹, Róbert Kubinec¹, Alexandra Szabóová¹, Jozef Višňovský¹, Anton Amann²

¹*Institute of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University in Bratislava, Slovakia, podolec@fns.uniba.sk*

²*Breath Research Unit, Austrian Academy of Sciences, Innsbruck, Austria*

Vyvinula sa metóda na simultánne stanovenie nepolárneho sevofluránu a jeho polárneho metabolitu hexafluóroizopropanolu v plazme. Metóda je založená na priamom dávkovaní až 150 vzoriek plazmy do GC systému bez nutnosti čistenia lineru injektora. Pri teplote injektora 80 °C nedochádza k degradácii makromolekúl, resp. polárnych látok nachádzajúcich sa v plazme a ani ku vzniku látok, ktoré by koeluovali s analytmi. Nepozorovalo sa zníženie účinnosti kolóny, ktoré by mohlo byť spôsobené znečistením začiatku kolóny rozkladnými produktami. Vypracovaná analytická metóda je veľmi rýchla. Nevyžaduje si žiadnu úpravu vzorky. Navyše výsledok meraní v porovnaní s headspace metódou nie je zvyšovaním teploty vzorky pred dávkovaním ovplyvnený a v prípade polárnejšieho, menej prchavého analytu stanovený obsah nezávisí od objemu vzorky vo vialke pri dávkovaní. V porovnaní s predchádzajúcimi metódami simultánneho stanovenia týchto analytov sa vyznačuje vyššou citlivosťou ako aj elimináciou chýb, ktorá súvisí s manipuláciou vzorky v laboratóriu. Vyznačuje sa vysokou opakovateľnosťou a citlivosťou s detekčným limitom 0,009 mg.l-1 pre sevoflurán a 0,018 mg.l-1 pre hexafluóroizopropanol v lineárnom rozsahu 0,050 - 150 mg.l-1. Metóda sa použila na stanovenie koncentrácie sevofluránu a hexafluóroizopropanolu v plazme 7 pacientov po narkóze.

Priemerná koncentrácia sevofluránu a voľného hexafluóroizopropanolu v plazme bola 57,2 mg.l-1 a 0,39 mg.l-1. Vyvinutá metóda stanovuje voľný, nekonjugovaný hexafluóroizopropanol, čo predstavuje asi 15 % z celkového obsahu hexafluóroizopropanolu. Najkritickejším bodom metódy stanovenia sevofluránu a hexafluóroizopropanolu je odber a spracovanie plazmy kvôli riziku odparenia a straty stanovovaných zlúčenín pri odbere krvi.

Prácu podporila Agentúra Ministerstva školstva, vedy, výskumu a športu Slovenskej republiky pre štrukturálne fondy EÚ pod číslom projektu ITMS 26240220007 a Agentúra na podporu výskumu a vývoja pod číslom projektu APVV-0416-10.

1Po73

PRÍPRAVA TROJVRSTVOVÉHO ZARIADENIA INCAT VHODNÉHO NA ANALÝZU METABOLITOV VO VÝDÝCHU

Peter Podolec¹, Alexandra Szabóová¹, Róbert Kubinec¹, Jaroslav Blaško¹, Ivan Ostrovský¹, Gabriela Addová¹, Renáta Górová¹, Jozef Višňovský¹, Viktor G. Berezkin²

¹*Institute of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University in Bratislava, Slovakia, podolec@fns.uniba.sk*

²*A.V. Topchiev Institute of Petrochemical Synthesis, Russian Academy of Science, Moscow, Russia*

Navrhnuté trojvrstvé mikroextrakčné zariadenie INCAT (inside needle capillary adsorption trap), naplnené sorbentmi Chromosorb W s 20% SE-54, Carbopack X a Carboxen 1000 v celom objeme ihly sa použilo na vzorkovanie, nakoncentrovanie a dávkovanie analytov do plynového chromatografu. Zariadenie INCAT umožňuje bezrozpušťadlovú, jedнокrokovú úpravu vzoriek. Na desorpciu zachytených analytov bol použitý injekčný port plynového chromatografu s modifikovaným kovovým linerom. V porovnaní s klasickou SPME je INCAT robustnejšou metódou, umožňujúcou opakované použitie pri viacerých analýzach. Ďalšími výhodami zariadenia INCAT oproti iným bezrozpušťadlovým metódam sú jednoduchosť zariadenia a možnosť kvantitatívne zachytiť látky so širokým spektrom prchavosti a polarity ako aj možnosť jeho použitia na ľubovoľnom komerčne dostupnom plynovom chromatografe. INCAT predstavuje environmentálne prijateľnú, rýchlu a finančne málo náročnú metódu predúpravy vzoriek.

Prácu podporila Agentúra Ministerstva školstva, vedy, výskumu a športu Slovenskej republiky pre štrukturálne fondy EÚ pod číslom projektu ITMS 26240220007 a Agentúra na podporu výskumu a vývoja pod číslom projektu APVV-0416-10.

**1Po74
SEPARACE A KONCENTROVÁNÍ URANU
Z PŘÍRODNÍCH VOD NA TIO-PAN
A PŘÍPRAVA VZORKŮ NA AMS**

Irena Špendlíková, Jakub Raindl, Mojmír Němec,
Ferdinand Šebesta, Alena Zavadilová, Jan John

*Katedra jaderné chemie, Fakulta jaderná a fyzikálně
inženýrská, České vysoké učení technické v Praze,
Břehová 7, 115 198 Praha 1,
SpendlikovaIrena@gmail.com*

Problematika separace uranu je stále intenzivně studovaná oblast (radio)chemie a uranového průmyslu. Jedná se zejména o dosud uspokojivě nevyřešenou problematiku jeho separace z vodného prostředí s vysokým obsahem rozpuštěných látek a velmi nízkou koncentrací uranu. Tato problematika se týká nejen likvidace zátěží životního prostředí po těžbě uranu, ale i jeho získávání z podzemní či mořské vody pro budoucí rentabilní produkci jaderného paliva.

V studované metodice separace uranu je použit unikátní kompozitní materiál vyvinutý na Katedře jaderné chemie; jedná se o hydratovaný oxid titaničitý zakotvený na pevném nosiči z polyakrylnitrilu (PAN). Cílem této studie je vyvinout vhodnou metodiku pro přípravu vzorků pro analýzy pomocí urychlovačové hmotnostní spektrometrie (AMS - Accelerator Mass Spectrometry) a stanovit poměr $^{236}\text{U}/\text{U}$. Na stanovení hodnot tohoto poměru se bude podílet pracoviště VERA ve Vídni.

Studovaným kompozitním materiálem byly naplněny separační kolonky, na které byla přiváděna vodovodní voda označená dusičnanem uranylu nebo roztok říční vody (Kocába, okres Příbram) s upraveným pH. Koncentrace uranu v roztocích před a po sorpci byla sledována metodou TRLFS (Time-Resolved Laser Fluorescence Spectroscopy). Sorpční materiály budou po ukončení experimentu spáleny a vzniklé vzorky analyzovány metodou AMS.

Tato práce vznikla za podpory grantu SGS 11/164/OHK4/3T/14.

POSTERY - SEKCIA 2
ANORGANICKÁ A MATERIÁLOVÁ
CHÉMIA

2Po01

THE USE OF A TiO₂/FeCl₃ MIXTURE IN ENVIRONMENTAL CLEANING TECHNOLOGY

Ewa Adamek¹, Wojciech Baran¹, Justyna Ziemiańska², Andrzej Makowski¹, Andrzej Sobczak^{1,2}

¹ Silesian Medical University, Department of General and Analytical Chemistry, Jagiellońska 4, 41-200 Sosnowiec, Poland; ewa.adamek@wp.pl

² Institute of Occupational Medicine and Environmental Health, Kościelna 13, 41-200 Sosnowiec, Poland

One of the methods allowing the use of solar energy being a renewable, alternative form of energy is the environmental cleaning technology. It was stated that many types of pollutants, regardless of their toxicity and resistance to biodegradation, can be effectively degraded in photocatalytic processes initiated by sunlight. Among many different heterogeneous photocatalysts examined, titania (TiO₂) is one of the commonly used in these processes. Unfortunately, in practice the main problem connected with the use of photocatalytic processes is their low quantum yield. In our opinion, the addition of Fe³⁺ salts to the reaction mixture will be a simple and inexpensive method that increases this yield. It was confirmed in studies on the photocatalytic degradation of many organic compounds, differing in chemical structure and properties [1-3].

The goal of our study was to compare the results of photocatalytic degradation carrying out in the presence of TiO₂ or Fe³⁺ salts as well in the presence of a mixture TiO₂ with Fe³⁺ salts. Based on the literature data and own previous studies we propose a probable mechanism of process carried out in the presence of TiO₂/Fe³⁺ mixture, showed in Fig.1.

It was found that the ability of organic substrates to form the coordination complexes with Fe³⁺ ions and their adsorption onto TiO₂ surface has the greatest effect on the course of photocatalytic reaction and its efficiency.

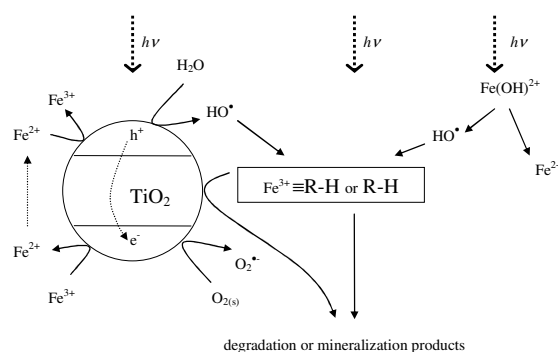


Fig. 1 The degradation mechanisms of organic substrate (RH) in the presence TiO₂/Fe³⁺-salts

- [1] V. Brezova, A. Blazkova, E. Borosova, M. Ceppan, R. Fiala: J. Mol. Catal., 98 (1995) 109–116.
 [2] H. Mestankova, G. Mailhot, J. Jirkovsky, J. Krysa and M. Bolte: Appl. Catal. B: Environ., 57 (2005), 257–265.
 [3] W. Baran, E. Adamek, A. Sobczak, A. Makowski: Appl. Catal. B: Environ., 90 (2009) 5 16-525.

2Po02

VLIV ZPŮSOBU SYNTÉZY NA BAREVNOST PEROVSKITOVÝCH SLOUČENIN

Lucie Adolfová, Petra Šulcová, Žaneta Dohnalová, Lucie Vaverková

Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Technologický pavilon, Doubravice 41, 53210 Pardubice, lucie.adolfova@student.upce.cz

Perovskity představují významnou skupinu chemických sloučenin z důvodu jejich široké aplikace, nacházejí uplatnění jako termicky stabilní kondenzátory v elektronickém průmyslu, dále jsou zkoumány jako potenciální materiály pro senzory plynů [1]. Mimo jiné se perovskity využívají pro výzkum nových luminoforů při výrobě displejů [2].

Pigmenty typu SrCr_xSn_{1-x}O₃ byly připraveny třemi různými způsoby. Prvním způsobem syntézy byla klasická keramická metoda. Výchozí sloučeniny (Cr₂O₃, SnO₂ a SrCO₃) byly homogenizovány a poté byly podrobeny dvoustupňové kalcinaci 1000 °C (3h) + 1200-1500 °C (3h). Druhou metodou byla příprava pomocí suspenzního mísení surovin. K výchozím surovinám byla přidána zpeňovadla (močovina a kyselina fumarová). Následně byla přidávána voda až do vzniku cca 30 % - ní vodní suspenze. Ta byla zpracována na ocelové plotně při teplotě přibližně 400 °C. Poloprodukt byl opět kalcinován ve dvou stupních. Třetí metodou byla

mechanoaktivace za sucha. Homogenizovaná směs vstupních surovin byla mechanoaktivována po dobu 5 hodin v planetárním mlýnu Pulverisette 5 (Fritsch GmbH, SRN) a poté opět podrobena dvoustupňové kalcinaci.

Připravené pigmenty byly aplikovány do keramické glazury G05091 (Glazura, s.r.o., ČR) a objektivně hodnoceny pomocí spektrofotometru ColorQuest XE (HunterLab, USA) [3]. U pigmentů byly dále studovány strukturní vlastnosti za použití vertikálního difraktometru D8 Advance (Bruker, VB).

Tento výzkum je podporován IGA Univerzita Pardubice (SGFChT04).

- [1] Azad Abdul-Majeed, Shyan Lucia Liew Woan, Pang Toh Yen: Journal of Alloys and Compounds 282, 109-124 (1999).
- [2] Wang Shumei, Lu Mengkai, Zhou Guangju, Zhang Haiping, Zhongsen Yang: Journal of Alloys and Compounds 452, 432 - 434 (2008).
- [3] Šulcová Petra: Vlastnosti anorganických pigmentů a metody jejich hodnocení, 2. vydání. Univerzita Pardubice, Pardubice (2008).

2Po03

ADSORPTION OF SURFACTANT ON THE ALUMINA PARTICLES IN THE PREPARATION OF CERAMIC FOAMS

Zora Bazelová¹, Miroslav Jamnický¹, Ladislav Pach¹, Ján Lokaj¹

¹Department of Ceramics, Glass and Cement, FCHPT, STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, zora.bazelova@stuba.sk

Dodecylbenzenesulfonic acid (DBSA) was applied as a surfactant to prepare alumina foams. Infrared spectroscopy (FTIR) was used to investigate the way of interaction (adsorption) of DBSA on the alumina surface. IR spectra of DBSA and that of alumina powder with DBSA were compared. It was found that the sulfonic group of DBSA interacts with the alumina surface. Thus, the shift of absorption peaks (1177, 1129, 1035, 1007 cm^{-1}) which can be attributed to SO_3 stretching vibrations and also that of adsorption peaks (1234, 909, 833 cm^{-1}) which can be attributed to OH deformation vibrations were observed. From these results follows that the probably mechanisms of adsorption may be attributed to 1. hydrogen bonding, 2. electrostatic interaction.

The work has received the financial support from the Slovak Grant for Science and Technology VEGA No. 1/0460/10.

2Po04

BIFUNKČNÍ LIGANDY DVOJMOCNÉ MĚDI

Jan Blahut¹, Jan Kotek¹, Ivana Císařová¹

¹Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy v Praze, Albertov 6, 128 43 Praha 2, blahutj@natur.cuni.cz

Možnost využití radiodiagnostického a radioterapeutického potenciálu izotopů mědi je spojena s nalezením vhodného, vysoce stálého a bifunkčního ligandu. Prezentovaný materiál je věnován nově připravenému derivátu 1,4,8,11-tetraazacyklotetradekanu (cyklam) modifikovanému bifunkčními aminobenzyl fosfinátovými skupinami v polohách 1 a 8. Uvedený ligand je výhodný pro svoji dobrou syntetickou dostupnost, vysokou rychlost komplexace mědi i v kyselém prostředí a především velkou kinetickou inertnost vzniklého měďnatého komplexu.

Kinetický izomer vzniká při pH 5 kvantitativně již po 2 minutách. Poločas rozkladu tohoto izomeru v kyselém prostředí 1M HClO_4 při 25 °C byl určen na 60 min. Zároveň je možno ligand modifikovat přes thiomocovinovou spojku aminosacharidy, což vytváří prostor pro přípravu radiofarmak interagujících s lektinovými proteiny v organismu.

Práce byla financována z grantu GAČR P207/11/1437

2Po05

STUDIUM PYROCHLOROVÝCH SLOUČENIN TYPU $\text{HO}_2\text{O}_3 - \text{CEO}_2 - \text{MOO}_3$

Lenka Bukovská, Jana Hořejší, Petra Šulcová

Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Technologický pavilon, Doubravice 41, 53210 Pardubice, E-mail: lenka.bukovska@student.upce.cz

V posledních letech jsou kladeny velké požadavky na rozvoj nových anorganických materiálů, které by nahradily průmyslově vyráběné pigmenty na bázi těžkých kovů, jež jsou zdraví nebezpečné a nepříznivě působí na životní prostředí. Cílem této práce bylo syntetizovat pyrochlorové sloučeniny obecného vzorce $\text{A}_2\text{B}_2\text{O}_7$, které mají všeobecně zajímavé vlastnosti, z nichž vyplývá i jejich široké využití např. pro pevné elektrolyty, katalyzátory, vysoce tepelně odolné potahové materiály atd. [1].

Příprava pigmentů typu $\text{Ho}_2\text{Ce}_{2-x}\text{Mo}_x\text{O}_7$ probíhala dvěma způsoby při různých teplotách výpalu. Pozornost byla zaměřena na vliv obsahu Mo, teploty výpalu a způsobu přípravy na výsledné zbarvení pigmentů. Dále u vybrané sloučeniny s obsahem $\text{Mo } x = 0,5$ bylo zhodnoceno ovlivnění barevného odstínu pomocí mineralizátorů a také vliv mletí na velikost částic. Všechny připravené pigmenty byly aplikovány do organického pojiva a objektivně hodnoceny pomocí přístroje ColorQuest XE (HunterLab, USA) v prostoru stejných barevných diferencí CIE $L^*a^*b^*$ (1976). Pigmenty byly také podrobeny měření distribuce velikosti částic na přístroji Mastersizer 2000 MU (Malvern Instruments Ltd., VB). Fázové složení bylo ověřováno difraktometrem Advance (Bruker AXS, VB) a bylo potvrzeno, že při vyšších teplotách dochází k tvorbě požadovaných jednofázových vzorků.

Tato práce vznikala za podpory IGA Univerzity Pardubice (SGFChT04).

[1] Zhan-Guo Liu, Jia-Hu Ouyang, Yu Zhou, Xiao-Liang Xia: *Ceramics International*, 35 (2009) 2387 – 2392

[2] Jana Hořejší: Diplomová práce, Pardubice, (2011)

2Po06

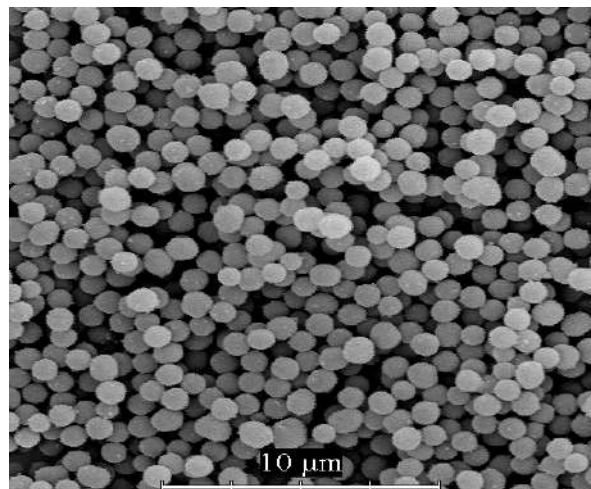
PRÍPRAVA MONODISPERZNÝCH NANOGULIČIEK SiO_2

Peter Čopan, Dušan Galusek

Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov, FChPT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, peter.copan@stuba.sk

Práca sa zaoberá prípravou monodisperzných nanoguličiek na báze SiO_2 modifikovanou Stöberovou metódou [1, 2] z roztokov s vysokou koncentráciou tetraetyl ortosilikátu (TEOS) ako zdroja SiO_2 . Východiskové reakčné zmesi metódou sól-gél obsahovali konštantné koncentrácie TEOS a vody (0,75 M, resp. 4,70 M). Koncentrácia amoniaku, ako morfológického katalyzátora, sa menila v intervale 0,3 M až 0,6 M. Ako rozpúšťadlo sa použil 2-propanol a teplota reakčnej zmesi bola 20°C . Po centrifugácii a vysušení sa výťažok pripravených SiO_2 nanoguličiek zvyšoval v závislosti od dĺžky reakčného času. Koncentrácia amoniaku mala zásadný vplyv na veľkosť pripravených SiO_2 nanoguličiek, pričom so vzrastajúcou koncentráciou amoniaku sa ich priemer zväčšoval. Veľkosti pripravených SiO_2 častíc boli v rozsahu od 150 nm do 900 nm. SEM analýza

potvrdila sférický tvar nanočastíc SiO_2 . RTG analýza poukázala na prítomnosť iba amorfnej formy oxidu kremičitého.



Obř. 1 Nanoguličky SiO_2 pripravené Stöberovou metódou

Táto práca bola realizovaná za podpory VEGA 0076.

[1] Werner Stöber, Arthur Fink, Ernst Bohn: Controlled growth of monodisperse silica spheres in the micron size range, *Journal of colloid and interface science* 26, 62-69 (1968)

[2] Xiao-Dong Wang, Zheng-Xiang Shen, Tian Sang, Xin-Bin Cheng, Ming-Fang Li, Ling-Yan Chen, Zhan-shan Wang: Preparation of spherical silica particles by Stöber process with high concentration of tetra-ethyl-orthosilicate, *Journal of colloid and interface science* 341, 23-29 (2010)

2Po07

AMINOBISFOSFINÁTY – SYNTÉZA A KOORDINAČNÍ VLASTNOSTI

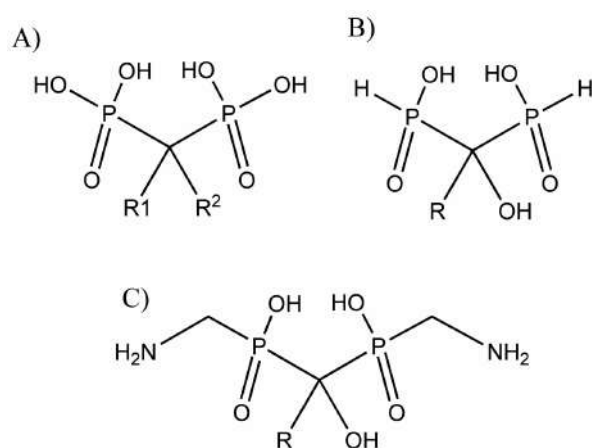
Tomáš David¹, Vojtěch Kubíček¹, Jana Havlíčková¹, Ivan Lukeš¹

¹*Katedra anorganické chemie, Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Hlavova 8, 128 40, Praha 2, Česká republika, tdavid275@gmail.com*

Geminální bisfosfonáty jsou intenzivně zkoumány vzhledem ke svému využití v léčbě a diagnostice kostních chorob. Tato aplikace je dána jejich afinitou k hydroxoapatitu, který je hlavní anorganickou složkou kostní tkáně. Bisfosfonáty obsahující v postraní řetězci aminoskupiny pak navíc ovlivňují funkci kostních buněk díky selektivní inhibici některých enzymů. Schopnost inhibice a související antibiotické či antivirotické působení by mohlo být využito i pro choroby, které nesouvisí přímo s kostní tkání. Proto jsme v rámci našeho výzkumu věnovali pozornost geminálním bisfosfonátům, u nichž je možno očekávat zanedbatelnou vazbu na kostní

tkáň při zachování základních koordinačních vlastností, které jsou důležité pro interakci s enzymy.

V rámci tohoto posteru je prezentována syntéza a základní studie bisfosfinátů a aminobisfosfinátů. Studované sloučeniny byly připraveny reakcí esterů kyseliny fosforené či fosfinových kyselin s acyhalogenidy. Sorpční studie potvrdila nízkou afinitu k hydroxyapatitu. Pomocí potenciometrie byly studovány koordinační vlastnosti aminobisfosfinátů, které potvrdily tvorbu stabilních komplexů s ionty přechodných kovů.



Obr. 1 Struktura bisfosfonátů (A), studovaných bisfosfinátů (B) a aminobisfosfinátů (C).

Za finanční podporu děkujeme grantovým projektům GAČR (No. P207/10/P153), GAUK (No. 310011) a výzkumnému záměru MŠMT ČR (No. MSM0021620857).

2Po08 CHARACTERIZATION OF COMPLEX OXIDES PREPARED BY BALL MILLING

M. Fabian¹, S. Suzuki², K. Shinoda², B. Antic³, A. Kremenovic³, F. Saito², Q. Zhang², P. Baláž¹, S. Indris⁴, V. Šepelák⁴

¹Institute of Geotechnics, Slovak Academy of Sciences, Košice, Slovakia

²Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials, Tohoku University, Sendai, Japan

³Institute of Nuclear Sciences „Vinča“, Belgrade, Serbia

⁴Institute of Nanotechnology, Karlsruhe Institute of Technology, Karlsruhe, Germany

The properties of nanomaterials are sensitive to microstructural and structural parameters, which in turn strongly depend on the preparation method. There is a challenge to improve physical performance (magnetization, coercivity,

conductivity, photoluminescence, etc.) by varying microstructural parameters (such as particle size and shape, strain and their anisotropy) using new or modified synthesis procedures. Among the many types of preparation techniques, the nonconventional mechanochemical synthesis has been recognized as a powerful route to novel, high-performance and low-cost nanomaterials.

This work is focused on the characterization of nanocrystalline oxides prepared by high energy ball milling. Structural and microstructural parameters of as-prepared samples have been investigated by various methods such as X-ray diffraction, X-ray photoelectron spectroscopy, nuclear magnetic resonance spectroscopy, Fourier transform infrared spectroscopy and transmission electron microscopy. To analyse the microstructural parameters (crystalline size and strain), the full-profile analysis, Warren-Averbach and simplified integral breadth method were used. The correlation between particular methods used for local structure investigation of nanocrystalline oxides have been discussed.

The present work was supported by the „Japan Society for the Promotion of Science“. Partial support by the Slovak Research and Development Agency (Grant APVV-0189-10 and SK-SRB 0019-09), the Scientific Agency of the Ministry of Education of the Slovak Republic and of the Slovak Academy of Sciences (Grant VEGA 2/0139/10) and DAAD is gratefully acknowledged.

2Po09 STRUCTURE AND CRYSTAL CHEMISTRY OF Ca₁₀(Cr^{VO}O₄)₆(Cr^{VI}O₄)

Dalma Gyepesová¹ and Vratislav Langer²

¹Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava,

²Department of Environmental Inorganic Chemistry, Chalmers University of Technology, SE-41296 Göteborg, Sweden, uachgyep@savba.sk

The title compound, decacalcium hexakis (chromate(V)) - chromate(VI), has attracted interest as significant phase in the system CaO - CrO_x. Its formation reduces refractoriness of calcium - rich composition of the system in an oxidizing atmosphere. Synthetists of the crystals assumed compound composition to be 9CaO.4CrO₃.Cr₂O₃. Structure analysis of 9CaO.4CrO₃.Cr₂O₃ proved the correct formula of the compound to be Ca₁₀(Cr^VO₄)₆(Cr^{VI}O₄). The presence of unusual chromium oxidation states, (V) and (VI), has been also found [1]. Redetermination of the title compound showed

the structure as an ideal racemic twin with volume fractions refined to 0.53 (3)/0.47 (3). The CrO₄ groups on a threefold axis (R3c) are disordered. Thus the title structure is composed of discrete CrO₄ tetraedra situated either on threefold axis in two possible orientation or in general positions whose charge is counterbalanced by calcium ions. Significant difference in bond lengths Cr—O in tetraedra CrO₄ proved the presence of Cr in two oxidation states in the title compound. Further, proved the positions of Cr^{VI} on threefold axis and those of Cr^V in general positions and finally correct formula of the title compound to be Ca₁₀(Cr^VO₄)₆(Cr^{VI}O₄). The Ca atoms are coordinated by 6, 7 and 8 oxygen atoms, respectively and the corresponding Ca—O distances vary from 2.284 (3) to 2.865 (3) Å. Ca atom on the threefold axis is surrounded by six oxygen atoms. Study of CaO sintering with the addition of Cr₂O₃ in the air atmosphere, where the decacalcium hexakis(chromate(V))-chromate(VI) occurs (in subsolidus area), intensification of shrinkage was observed which may indicate increased grain boundary diffusion in comparison with the pure CaO. The acceleration of this process depends on transport of Ca ions [2]. From stereochemical viewpoint there are free spaces in the title compound in the vicinity of threefold axis and their size is affected by disordered occupancies of O and Cr positions. This way rapid transfer of Ca ions across the free spaces can be assumed in the chemical potential gradient.

[1] D. Gyepesová and M. Handlovič (1980). Symp. über Spezielle Probleme der Röntgen-Kristallanalyse, Gesammelte Beiträge, Hohengrün, GDR, 90-92

[2] V. Figusch, M. Haviar and Z. Pánek (1979). *Silik8ty* **23**[4], 307-314

2Po10 MEDZIMOLEKULOVÉ INTERAKCIE V KRYŠTÁLOVÝCH ŠTRUKTÚRACH DVOCH KOMPLEXNÝCH ZLÚČENÍN MEDI S HEXAFLUORIDOKREMIČITANOVÝM ANIÓNOM

Jaroslava Haníková, Juraj Kuchár, Juraj Černák

Katedra anorganickej chémie, Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Moyzsova 11, 041 54 Košice, SR

V rámci širšieho štúdia korelácie kryštálovej štruktúry a magnetických vlastností [1, 2] sa zo

sústav Cu²⁺ – en, resp. dmen – SiF₆²⁻ (en = etán-1,2-diamín, dmen = N,N-dimetyl-etán-1,2-diamín) izolovali dve nové zlúčeniny [Cu(en)₂SiF₆]_n (**1**) a [Cu(dmen)₂(H₂O)]SiF₆ (**2**). Pripravené látky boli charakterizované chemickou prvkovou analýzou a IČ spektroskopiou. Kryštálová štruktúra **1** (Oxford diffraction, R1 = 0.022) pozostáva z reťazcov [-Cu(en)₂-F-SiF₄-F-]_n tvorených komplexnými kationmi [Cu(en)₂]²⁺ a aniónmi μ₂-SiF₆²⁻; mostíkové atómy fluóru sú umiestnené v *trans* polohách predĺženej tetragonálnej bipyramídy CuN₄F₂. Kryštálová štruktúra **1** je stabilizovaná vodíkovými väzbami typu N-H...F, ktoré vedú k dvojrozmernej supramolekulovej štruktúre. V molekulovej kryštálovej štruktúre **2** (Oxford diffraction, R1 = 0.0269) je atóm Cu(II) pentakoordinovaný v tvare deformovanej tetragonálnej pyramídy štyrmi atómami dusíka z dvoch chelátovo viazaných ligandov dmen, kým v apikálnej polohe vo väčšej vzdialenosti sa nachádza akva ligand. Štruktúra **2** je stabilizovaná vodíkovými väzbami typov O-H...F a N-H...F pôsobiacimi medzi komplexnými kationmi a hexafluoridokremičitanovými aniónmi.

Za finančnú podporu ďakujeme projektom VEGA-1/0089/09, APVV-VVCE-0058-07 a VVGS PF 22/2011/CH.

[1] J. Černák, J. Haníková, J. Kuchár, E. Čižmár, Z. Trávníček, J. Mol. Struct., 963 (2010) 71.

[2] J. Hanko, M. Orendáč, J. Kuchár, Z. Žák, J. Černák, A. Orendáčová, A. Fehera, Solid State Commun. 142 (2007) 128.

2Po11 CYTOTOXICITA ALLYLOVÝCH A CYKLOPENTADIENYLOVÝCH KOMPLEXOV MOLYBDÉNU

Jan Honzík¹, Peter Boháčik¹, Jaromír Vinklár¹, Martina Řezáčová², Karolína Foltánová²

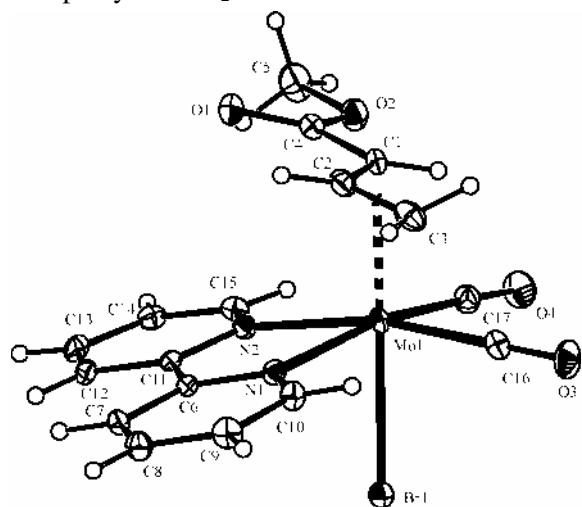
¹*Katedra obecné a anorganickej chémie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká Republika, jan.honzicek@upce.cz*

²*Ústav lékařské biochemie lékařské fakulty Univerzity Karlovy v Hradci Králové, Šimkova 870, 500 01 Hradec Králové, Česká Republika*

Allylové a cyklopentadienylové komplexy molybdénu [(η³-C₃H₅)Mo(CO)₂L₂X] (L₂ = N,N-, N,O- a P,P-chelátujúci ligand, X = halogenid), [(η⁵-Cp)Mo(CO)₂L₂][BF₄] (L₂ = N,N-, P,P- a S,S-chelátujúci ligand) a [(η⁵-Cp)₂MoCl₂] vykazujú cytostatické vlastnosti, ktoré sú v poslednej dobe intenzívne študované [1,2]. Komplexy [(η³-C₃H₅)Mo(CO)₂L₂X] (L₂ = N,N- a L₂ = N,N-

ligand, chelátujúci ligand, X = halogenid) a $[(\eta^5\text{-Cp})\text{Mo}(\text{CO})_3\text{X}]$ (X = halogenid, alkyl) sa dajú použiť aj ako katalyzátory pre oxidačné reakcie. Po zoxidovaní centrálného atómu na oxidačný stav (VI), tieto komplexy môžu katalyzovať oxidáciu olefínov na epoxidy, oxidovať sulfidy na sulfoxidy a sulfóny. Komplexy typu $[(\eta^5\text{-Cp})_2\text{MoCl}_2]$ sú schopné katalyzovať veľa reakcií, napríklad hydratácia nitrilov, hydrolýza esterov a výmena H/D.

Cieľom tejto práce bolo pripraviť allylové komplexy $[(\eta^3\text{-C}_3\text{H}_5)\text{Mo}(\text{CO})_2\text{L}_2\text{Cl}]$ a $[(\eta^3\text{-C}_3\text{H}_4\text{COOMe})\text{Mo}(\text{CO})_2(\text{L})_2\text{Br}]$ (L_2 = bipy, phen, 5- NO_2 -phen) a cyklopentadienylové komplexy molybdénu $[(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_4\text{R})\text{Mo}(\text{CO})_2\text{L}_2][\text{BF}_4]$ (R = H, 4-MeOC₆H₄CH₂, 3,4,5-(MeO)₃C₆H₂CH₂, L_2 = bipy, phen). Všetky pripravené komplexy boli charakterizované pomocou infračervenej, Ramanovej a NMR spektroskopie. Štruktúra komplexu $[(\eta^3\text{-C}_3\text{H}_4\text{COOMe})\text{Mo}(\text{CO})_2(\text{bipy})\text{Br}]$ bola určená pomocou röntgenoštruktúrnej analýzy (Obr. 1). Komplexy pripravené v rámci tejto práce boli podrobené testom na leukemických bunkách MOLT-4. Predbežné výsledky ukazujú, že komplexy s bipyridínom a fenantrolínom vykazujú vyššiu cytotoxicitu než komplexy s 5- NO_2 -fenantrolínom.



Obr. 1 Štruktúra komplexu $[(\eta^3\text{-C}_3\text{H}_4\text{COOMe})\text{Mo}(\text{CO})_2(\text{bipy})\text{Br}]$.

Táto práca vznikla za podpory MŠMT 0021627501.

- [1] Norton de Matos, M. R. P.; Romão, C. C.; Pereira, C. C. L.; Rodrigues, S. S.; Mora, M.; Silva, M. J. P.; Alves, P. M.; Reis, C. A. International Patent WO/2005/087783.
- [2] Saraiva, M. S.; Quintal, S.; Portugal, F. M. C.; Lopes, T. A.; Félix, V.; Nogueira, J. M. F.; Meireles, M.; Drew, M. G. B.; Calhorda, M. J. J. Organomet. Chem. 2008, 693, 3411-3418.

2Po12 UHLÍKOVÉ VRSTVY A JEJICH ELEKTRICKÉ VLASTNOSTI

Tomáš Hubáček¹, Marek Staszek¹, Václav Švorčík¹

¹ Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, Praha, 166 28, hubacekt@vscht.cz

Díky schopnosti uhlíku vytvářet různé alotropické modifikace nacházejí v dnešní době uhlíkové nano-vrstvy značné využití. U těchto vrstev lze dosáhnout vysoké elektrické vodivosti při „malých“ tloušťkách vrstev (řádově jednotky nanometrů [1]). Těto vlastnosti lze využít v elektronice pro výrobu prvků např. s nelineárním charakterem vodivosti (polem řízený tranzistor) [2].

Tato práce se zabývá studiem elektrické vodivosti včetně její teplotní závislosti pro uhlíkové vrstvy připravené napařováním. Napařování bylo prováděno metodou flasch [3]. Vrstvy byly připraveny na polymerní substráty (PET a PTFE). Tloušťky připravených carbon layers se pohybují v rozmezí 5 – 80 nm a vykazují plošnou elektrickou resistivitu řádově $\text{k}\Omega\text{-T}\Omega$. Při teplotním namáhání dochází k změnám hodnot elektrického odporu vrstvy, s klesající teplotou dochází k poklesu hodnoty odporu. Z teplotní závislosti rezistivity (T vs. $\ln R$) lze usuzovat na charakter vodivosti připravených vrstev. U zkoumaných vrstev se výrazně projevuje hopping mechanismus v širokém rozmezí teplot. Pomocí UV-Vis spekter a Tauc relace byla určena optická šířka zakázaného pásu E_g^{opt} , hodnoty E_g^{opt} se pro studované vrstvy pohybují v desetinách eV. Zmíněné vlastnosti vrstev jsou závislé na jejich složení, které bylo stanoveno pomocí Ramanovy spektroskopie.

Tato práce vznikla za podpory GACR 106/09/0125, AS CR KAN 200 100801

- [1] Hubáček T., Lyutakov O., Rybka V., Švorčík V. *J Mater Sci* 45 (2010) 279
- [2] Liao L., Duan X.F., *Mat Sci Eng R* 70 (2010) 354
- [3] Švorčík V., Hubáček T., Slepíček P., Siegel J., et. al *Carbon* 47 (2009) 1770

2Po13**ADSORPČNÍ VLASTNOSTI ANTIMONU V POROVNÁNÍ S ARSENEM**

Bohumila Jakubíková, Barbora Doušová, Stanislava Krejčová

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

Antimon (Sb) a arsen (As) jsou metaloidy patnácté skupiny periodické soustavy a jedná se o prvky toxické a karcinogenní. Antimon se v životním prostředí vyskytuje ve formách oxoaniontů Sb (III), Sb (V) a v omezené míře také ve formách organosloučenin. Mezi nejvýraznější antropogenní zdroje patří spalování fosilních paliv. Jeho sloučeniny se také používají jako nehořlavé příměsi v řadě průmyslových výrob, především v automobilovém průmyslu, ve výrobě PET lahví, baterií či diod. Jeho přirozené koncentrace se pohybují řádově v $\mu\text{g}\cdot\text{l}^{-1}$, v kontaminovaných oblastech až v jednotkách $\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$ [1]. Sorpční vlastnosti arsenu již byly v minulosti velmi dobře popsány, zatímco o sorpčních vlastnostech, toxicitě a chování antimonu v životním prostředí existuje dosud pouze omezené množství literatury. [2]

Cílem této práce bylo proto porovnat sorpční vlastnosti arsenu a antimonu a charakterizovat použité materiály (oxidy hydroxidy železa, biosorbenty, modifikované biosorbenty). V rámci této práce byly proměřeny sorpční řady antimonu a arsenu a byly stanoveny hodnoty sorpčních účinností a maximálních sorpčních kapacit sorbentů. Antimon v přírodě velmi často doprovází arsen, proto byly v další části práce proměřeny také kompetitivní sorpce. Na závěr byla proměřena kinetika sorpčních dějů.

Tato práce je součástí projektu P210/10/0938 (Grantová agentura České Republiky). Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum MŠMT (Rozhodnutí č. 21/ 2011) a výzkumným programem (MSM 6046137302).

[1] Pavel Pitter: Hydrochemie, VŠCHT, Praha (2009).

[2] Susan C. Wilson, Peter V. Lockwood, Paul M. Ashley, Matthew Tighe: Environmental Pollutions, (2010), 1169-1181.

2Po14**INFLUENCE OF CLAY FILLERS ON PROPERTIES OF POLYMERIC MATERIALS**

Zuzana Jankurová¹, Marianna Pajtášová¹, Darina Ondrušová¹, Mária Kopcová¹

¹*Faculty of Industrial Technologies in Púchov, University of Alexander Dubček in Trenčín, I.Krasku 491/30, 020 01 Púchov, jankurova.z@centrum.sk*

At present, the improving of properties of polymeric materials is the main priority in the rubber industry. The clays and clay minerals are added into polymeric materials in a function of fillers. The fillers are important additives in rubber compounds to improve of the final properties [1].

The present work deals with the preparation and study of rubber compounds with addition of bentonite and kaolin fillers. The prepared rubber compounds were submitted the measurements of processing and physical – mechanical properties (tensile strength, modulus 300, tensibility, hardness) and vulcanization characteristics (ML, MH, ts, t90, Rv), which were compared with the polymeric materials of original compositions [2].

JESENÁK, K.: Přírodní ílové nanokompozity, Chem. Listy 101, (2007), 657-664.

DUCHÁČEK, V.: Polymery - výroba, vlastnosti, zpracování, použití. 2. vyd. Vysoká škola chemicko - technologická v Praze, Praha, (2006), 154.

2Po15**PRÍPRAVA ARAGONITU Z DUSIČNANU VÁPENATÉHO**

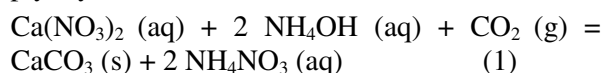
Jana Jurišová, Ladislav Pach, Pavel Fellner, Jana Gabčová, Vladimír Danielik

Oddelenie anorganickej technológie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, jana.jurisova@stuba.sk

Z troch vznikajúcich kryštalických fáz CaCO_3 – stabilný kalcit, nestabilný vaterit a aragonit sa práve aragonit považuje za látku s najvyšším potenciálom ovplyvňovať mechanické a optické vlastnosti materiálov, v ktorých sa nachádza ako plnivo. Ako nanášací pigment môže zlepšovať odolnosť a belosť alebo upravovať priehľadnosť papiera.

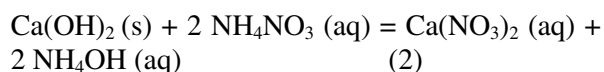
Syntéza je založená na reakcii iónov Ca^{2+} a CO_3^{2-} vo vodných roztokoch, čo poskytuje veľa možností ako riadiť precipitáciu CaCO_3 a jeho

vlastnosti. My sme sa zamerali na prípravu CaCO_3 aragonitového typu s veľkosťou kryštálov menších ako $1 \mu\text{m}$, a to z roztoku dusičnanu vápenatého. Aniónová zložka CO_3^{2-} sa vnášala plynným CO_2 :



Reakcia prebiehala pri teplotách vyšších ako 50°C , keďže pre tvorbu aragonitu je vhodná vyššia teplota [1]. Veľkosť a tvar častíc sme sa pokúsili ovplyvniť použitím rôznych dopantov, zmenou koncentrácie zložiek, nastavením teploty, tlaku a vhodného spôsobu miešania v systéme.

Pri väčšine experimentov sa vychádzalo z p.a. chemikálií a niektoré z týchto experimentov sa overovali na odpadovom vápne z výroby acetylénu (karbidové vápno).



Táto práca vznikla v rámci projektu VMSP-P-0088-09 a projektu APVV-03877-10.

[1] Gmelins Handbuch der anorganischen Chemie, 8. Auflage, Calcium, Teil B – Lieferung 3, 1961, Verlag Chemie, GMBH. Weinheim/Bergstrasse, str. 861-881.

2Po16

STUDIUM MECHANISMŮ IZOMERIZACÍ PLANÁRNÍCH SLOUČENIN PLATINY A PALLADIA

Aleš Kalup, Michal Čajan, Zdeněk Trávníček

Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci, Tr. 17. listopadu 12, 779 00 Olomouc, michal.cajan@upol.cz, ales.kalup@upol.cz

Planární platnaté komplexy mohou vykazovat cytostatickou aktivitu, a některé z nich, například *cisplatina*, *karboplatina* nebo *oxaliplatin*, reprezentují stávající protinádorová léčiva na bázi platiny. Tyto sloučeniny však mají řadu vedlejších negativních účinků, a proto jsou hledány jejich nové, vhodnější deriváty. Jeden ze souvisejících problémů je spojen se skutečností, že sloučeniny typu PtX_2Y_2 mohou existovat ve formě *cis*- nebo *trans*-izomeru, přičemž termodynamicky stabilnější jsou *trans*-izomery. Přestože je problematika těchto přeměn studována již poměrně dlouho, jejich mechanismus dosud nebyl zcela jednoznačně objasněn.

Příspěvek prezentuje výsledky kvantově-chemické analýzy tří v literatuře uvažovaných

mechanismů, mechanismu adičně-eliminačního [1], eliminačně-adičního [2] a intramolekulárního přesmyku ligandů [3]. Dále byl navržen mechanismus uvažující reakci v excitovaném stavu. Pro všechny mechanismy byla provedena analýza hyperploch potenciální energie s cílem nalézt tranzitní stavy, případně meziproducty izomerizace. Na základě porovnání energetických profilů všech reakčních cest se nejpravděpodobnějším ukázal být mechanismus vedoucí přes excitovaný stav. Tento mechanismus byl dále testován na komplexech obecného vzorce ML_2Cl_2 , kde $\text{M} = \text{Pt}$ nebo Pd , L je monodentátní dusíkatý heterocyklický ligand (imidazol, N-methylimidazol, pyridin, atd.). Z metodického hlediska byly použity Hartree-Fockova metoda a DFT metoda s hybridním funkcionálem B3LYP. Pro analýzu excitovaných stavů byly využity metody CI a TD-DFT.

Práce byla realizována s finanční podporou Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy (MSM6198959218), Grantové agentury Akademie věd ČR (IAA401370901) a IGA PrF UP v Olomouci (PrF_2011_014).

[1] A. L. Casado, P. Espinet: *Organometallics* 17, 954 (1998).

[2] D. Minniti: *Inorg. Chem.* 33, 2631 (1994).

[3] M. S. Hannu-Kuure, J. Komulainen, R. Oilunkaniemi, R. S. Laitinen, R. Suontamo, M. Ahlgrén: *J. Organomet. Chem.* 666, 111 (2003).

2Po17

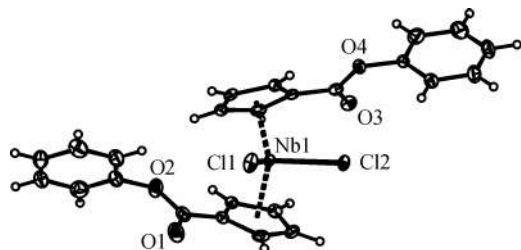
NIBOCENOVÉ SLOUČENINY SUBSTITUOVANÉ NA CYKLOPENTADIENYLOVÝCH KRUIČÍCH

Iva Klepalová¹, Jan Hozíček¹, Milan Erben¹, Jaromír Vinklárěk¹

¹ Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, iva.klepalova@volny.cz

Niobocenové sloučeniny substituované na cyklopentadienylových kružích ($(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_4\text{R})_2\text{NbCl}_2$, $\text{R} = 4\text{-MeOC}_6\text{H}_4\text{CH}_2\text{-}$, $3,4,5\text{-(MeO)}_3\text{C}_6\text{H}_2\text{CH}_2\text{-}$, $\text{-CH}_2\text{CH}_2\text{OMe}$, -COOMe , -COOEt , -COOPh , $\text{-COOCH}_2\text{CH}_2\text{OMe}$ a $\text{-C}_3\text{F}_4\text{N}$) byly připraveny reakcí $\text{NbCl}_4 \cdot 2\text{THF}$ s příslušným cyklopentadienidem sodným (lithným). Dichloridové komplexy byly převedeny na dibromidové pomocí BBr_3 . Připravené niobocenové komplexy byly charakterizovány pomocí spektroskopických metod (infračervená spektroskopie a EPR). Struktury sloučenin ($\eta^5\text{-}$

$C_5H_4CH_2CH_2OMe)_2NbCl_2$, $(\eta^5-C_5H_4COOMe)_2NbBr_2$, $(\eta^5-C_5H_4COOEt)_2NbBr_2$ a $(\eta^5-C_5H_4COOPh)_2NbCl_2$ byly určeny pomocí rentgenostrukturní analýzy.



Obr. 1 Rtg struktura $(\eta^5-C_5H_4COOPh)_2NbCl_2$

Tato práce vznikla za podpory grantového projektu SG310001.

2Po18

THE COMPARISON OF ZEOLITE FILLER AND CARBON BLACK FILLER EFFICIENCY IN POLYMERIC MATERIALS

M. Kopcová, D. Ondrušová, M. Pajtášová, M. Ďurčeková, M. Čechová, Z. Jankurová, E. Jóna

Univerzita Alexandra Dubčeka v Trenčíne, Fakulta priemyselných technológií, Katedra anorganických materiálov a environmentálneho inžinierstva, I. Krasku 491/30, 02001 Púchov, Slovensko, m.kopcova@centrum.sk

The main priority in the rubber industry is production of environmentally friendly rubber compounds in according with high quality of products, so in the first position comes substitution of some problematic substances with their ecological substituents. In the function of filler in the real rubber compounds the carbon black is currently used. Carbon black (Fig. 1) is a problematic substance because of its negative impact not only on environment but mainly on health of workers.

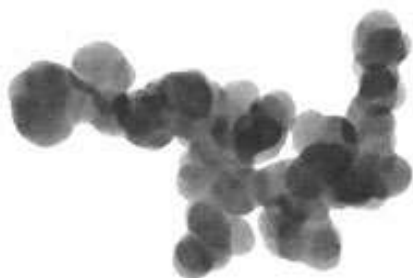


Fig. 1 Electron microscope image of carbon black

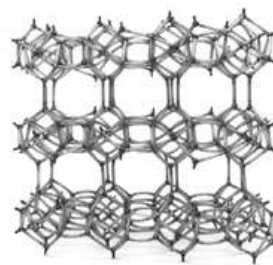


Fig. 2 Structure of zeolite

This problem can be solved by the way of substitution of carbon black with some ecological additive. Natural zeolites form a group of hydrated aluminosilicates with the porous structure (Fig 2). The special porous structure of zeolite has lots of practical applications as an ion-exchange, adsorbent, material for reversible hydration and dehydration and also as a ecological nanofiller in polymeric materials [1,2]. The application of inorganic materials in organic polymers is one of usual way to improve up of mechanical properties of polymeric materials [3]. The present work deals with the preparation of monoionic form - Zn(II) zeolite and their application into rubber compounds in the role of filler. The vulcanization performance of rubber compounds prepared and physical-mechanical properties of vulcanizates were measured and the efficiency of zeolite filler and carbon black filler was evaluated.

Keywords: Zeolite filler, carbon black, efficiency, rubber compound, vulcanization performance physico-mechanical properties.

- [1] JESENÁK, K.: Prírodné ílové nanokompozity, *Chem. Listy* 101, (2007), 657-664.
- [2] ONDRUŠOVÁ D. a kol.: Preparation and properties of ecologically modified rubber compounds. *Chemické Listy* 102, 733-740, 2008.
- [3] ŠAMAJOVÁ, E.: Z histórie výskumu zeolitových surovín Slovenska, Seminár Prírodné a syntetické zeolity, FCHPT STU Bratislava, 2003.

2Po19

VLIV VYBRANÝCH CHARAKTERISTIK PŮD NA JEJICH ADSORPČNÍ SCHOPNOSTI

Stanislava Krejčová, Barbora Doušová, Bohumila Jakubíková

Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha, Stanislava.Krejцова@vscht.cz

Půdy, stejně jako dnové sedimenty, fungují v životním prostředí jako přirozené akumulátory některých toxických prvků. Stabilitu, resp. mobilitu [1, 2] těchto toxikantů v půdách mohou

ovlivňovat některé půdní charakteristiky. Cílem této práce je posouzení vlivu těchto charakteristik (obsah Fe, obsah jílových minerálů, obsah organického uhlíku, pH, pH_{ZPC} , hloubky odběru...) na sorpční schopnosti půd. V této práci byly použity vzorky čistých a kontaminovaných půd a byly proměřeny jejich sorpční schopnosti. Kontaminované půdy byly odebrány z povodí Labe (kontaminace As), z Chráněné krajinné oblasti Český kras (kontaminace Se) a z okolí Kovohutě Příbram (kontaminace As a Sb). Sorpční testy byly pro srovnání provedeny i na vzorcích komerčních čistých půd. Jako modelové roztoky byly použity roztoky oxoaniontů zmiňovaných kontaminantů (As, Se, Sb) v různých koncentracích a při různém pH. Obsah Fe, As a Sb byl v mineralizovaných vzorcích kontaminovaných půd měřen metodou AAS, zbytkové koncentrace As, Se byly měřeny metodou HG-AFS, zbytková koncentrace Sb metodou AAS. Bylo zjištěno, že na sorpční vlastnosti půd má vliv přítomnost Fe, jejich sorpční schopnosti se zlepšují s nižší odběrovou hloubkou, tedy i se zvyšujícím se obsahem organického uhlíku.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum MŠMT (Rozhodnutí č. 21/2011)

[1] Greta M. Eskenazy: Chem. Geol., (1995)

[2] Konstantina Tyrovolá, Nikolaos P. Nikolaidis: Water res., (2009)

2Po20

FYZIKÁLNO-CHEMICKÁ ANALÝZA SYSTÉMU $(\text{FLiNaK})_{\text{eut}}\text{-K}_2\text{ZrF}_6$

Blanka Kubíková¹, Viliam Pavlík¹, Iveta Macková¹, Veronika Gurišová¹, Miroslav Boča¹

¹Ústav anorganickej chémie SAV, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, blanka.kubikova@savba.sk

V posledných desaťročiach stúpol záujem o využitie vysokoteplotných roztavených solí na báze halogenidov v jadrovej energetike. Tento fakt je úzko spätý s obnovou tzv. 4. Generácie jadrových reaktorov. Zo súboru rôznych typov reaktorov, reaktor na báze roztavených solí predstavuje najambicióznejší typ pre konvenčné využitie [1]. V týchto aplikáciách plnia roztavené soli úlohu kvapalného paliva ako i chladiva. Roztavené soli na báze zirkónia reprezentujú jeden z uvažovaných systémov paliva či chladiva.

Tento príspevok predstavuje výsledok z fyzikálno-chemickej analýzy roztaveného systému $(\text{FLiNaK})_{\text{eut}}\text{-K}_2\text{ZrF}_6$. Študoval sa vplyv prídavku roztavenej eutektickej zmesi LiF-NaF-

KF ku K_2ZrF_6 v celom koncentračnom rozsahu na teplotu primárnej kryštalizácie, na objemové vlastnosti, ako i povrchové napätie a viskozitu. Z experimentov vyplýva, že prídavok zmesi $(\text{FLiNaK})_{\text{eut}}$ v širokom koncentračnom interval nemá zásadný vplyv na študované fyzikálno-chemické vlastnosti. Následná rtg. prášková analýza zatuhnutých vzoriek potvrdila prítomnosť východiskových látok, zlúčeniny K_3ZrF_7 a v niektorých prípadoch aj ZrO_2 .

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. LPP-0345-09. Príspevok bol vytvorený realizáciou projektu Centrum pre Materiály, vrstvy a systémy pre Aplikácie a Chemické procesy v extrémnych podmienkach – Etapa II na základe podpory operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja.

[1] T. Abram, S. Ion Energy Policy 36 (2008) 4323-4330.

2Po21

NOVEL CU(II) COMPLEXES BASED ON SQUARE TETRACYANIDOMETALLATES

Juraj Kuchár, Veronika Suchá, Juraj Černák

Department of Inorganic Chemistry, Institute of Chemistry, P. J. Šafárik University in Košice, Moyzesova 11, SK-04154 Košice, Slovakia, juraj.kuchar@upjs.sk

Previous structural and magnetic studies on $\text{Cu}(L_N)_2\text{M}(\text{CN})_4$ type complexes (L_N = bidentate N-donor chelating ligands, M = Ni, Pd) revealed its different structural and magnetic dimensionalities [1,2]. As a continuation of these studies we have isolated and structurally characterized from the aqueous systems $\text{Cu}^{2+} - L_N - [\text{M}(\text{CN})_4]^{2-}$ four new complexes: $\text{Cu}(\text{dmen})\text{Ni}(\text{CN})_4$ (**1**, *dmen* = N,N-dimethyl-ethane-1,2-diamine), $\text{Cu}(\text{dmen})\text{Pd}(\text{CN})_4$ (**2**), $\text{Cu}(\text{tmen})\text{Pd}(\text{CN})_4$ (**3**, *tmen* = N,N,N',N'-tetramethyl-ethane-1,2-diamine) and $\text{Cu}(\text{teen})\text{Ni}(\text{CN})_4$ (**4**, *teen* = N,N,N',N'-tetraethyl-ethane-1,2-diamine). All these complexes exhibit polymeric structures built up of $[\text{Cu}(L_N)]^{2+}$ cations with pentacoordinated Cu(II) atoms and square $[\text{Pd}(\text{CN})_4]^{2-}$ anions. As a consequence of the bridging character of the cyanido ligands linking Cu(II) and Pd(II) atoms various types of two-dimensional polymeric structures were formed. Hydrogen bonds of the N-H...N type link the formed layers and thus enhance the dimensionality of the formed structures.

This work was supported by the Slovak grant agency APVV under contracts Nos. APVV-VVCE-0058-07 and APVV-0006-07, and by grant agency VEGA (grant 1/0089/09).

- [1] Kuchár J., Černák J., Mayerová, Z., P. Kubáček, Žák Z., *Sol. State Phenom.*, 2003, 90-91, 328.
 [2] Čižmár E., Orendáčová A., Orendáč M., Kuchár J., Vavra M., Potočník I., Černák J., Casini E., Feher A., *Phys. Stat. Sol. B-Bas. Res.*, 2006, 243, 268.

2Po22

DIELEKTRICKÉ VLASTNOSTI TEPLOTNĚ NAMÁHANÝCH TENKÝCH VRSTEV Au NA SKLE

Ondřej Kvítek¹, Václav Švorčík¹

¹Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha, kviteko@vscht.cz

Tvorba tenkých kovových vrstev na oxidických substrátech má nezastupitelný význam při výrobě mikroelektronických součástek. Jak postupuje miniaturizace, jsou vyvíjeny nové a stále dokonalejší metody přípravy stále tenčích kovových vrstev. Jak se však rozměry připravovaných materiálů stále zmenšují, přicházíme k hranici silného vlivu kvantových jevů [1] a struktury mohou ztrácet požadované vlastnosti a naproti tomu nabývat nové, dříve nepozorované [2,3]. Z tohoto důvodu roste potřeba studia vlastností tenkých kovových vrstev z hlediska jejich stávajících aplikací i možností aplikací zcela nových.

V této práci byly studovány tenké zlaté vrstvy připravené metodou katodového naprašování s různou dobou depozice. Vzorky byly následně teplotně namáhány a byly vyšetřovány jejich elektrické vlastnosti a morfologie povrchu.

Bylo zjištěno, že u připravených vzorků dochází k dramatické změně povrchové morfologie při žíhacích teplotách již kolem 300°C, což je u objemového zlata jev nepozorovaný. Změna povrchové morfologie má pak vliv na další pozorované vlastnosti tenkých vrstev. V UV-Vis spektru materiálu se objevuje pás povrchové plasmonové rezonance, čehož je možné využít k výpočtu optického zakázaného pásu Taucovou metodou. Výskyt zakázaného pásu energie nasvědčuje, že materiál nabývá polovodivých vlastností, proto bylo využito elipsometrických měření ke zjištění elektrické permitivity, což potvrzuje domněnku o polovodivých vlastnostech.

Tato práce vznikla za podpory grantů GA CR 108/10/1106 a AS CR KAN 200 100801.

- [1] E. Roduner: *Chem. Soc. Rev.* 35, 583-592 (2006)
 [2] V. Švorčík, O. Kvítek, O. Lyutakov, J. Siegel, Z. Kolská: *Appl. Phys. A* 102, 747-751 (2011)
 [3] J. Siegel, O. Kvítek, P. Slepíčka, J. Náhlík, J. Heitz, V. Švorčík: *Nucl. Instrum. Meth. B*, acc. manuscript

2Po23 REHYDRATAČE METAKAOLINU

Miloslav Lhotka¹, Vladimír Machovič², Barbora Doušová³, David Koloušek³

¹VŠCHT Praha, Ústav anorganické technologie, Technická 5, Praha 6-Dejvice, 166 28, Tel.: +420220445019, e-mail: Miloslav.Lhotka@vscht.cz

²VŠCHT Praha, Centrální laboratoře, Technická 5, Praha 6-Dejvice, 166 28

³VŠCHT Praha, Ústav chemie pevných látek, Technická 5, Praha 6-Dejvice, 166 28

Použití jílových materiálů jako selektivních sorbetů pro odstranění škodlivých látek je velice efektivní a účinné. Metoda rehydratace metakaolinu otevírá další možnosti přípravy těchto efektivních anionaktivních sorbentů z druhořadých nebo odpadních jílu. V průběhu rehydratace metakaolinu v autoklávu dojde k extrémnímu zvýšení specifického povrchu materiálu, a tím i k předpokládanému zlepšení adsorpčních vlastností. Vzorky přírodního kaolinu byly převedeny na metakaolin při teplotě 650°C po dobu 3 hodin a poté podrobeny hydrotermální rehydrataci v autoklávu při různých teplotách po dobu 1, 4, 7 a 14 dní, ve stejném režimu byl také připraven kaolin modifikovaný kationem Fe³⁺ pro selektivní adsorpci anionů. Byla provedena kinetika této dehydratace s následnou charakterizací vzniklé fáze pomocí RTG difrakce a IČ spektrometrie. Výsledky těchto dvou metod potvrdily, že již po jednom dni expozice v autoklávu dochází k obnovení struktury kaolinu. Na připravených vzorcích bylo dále provedeno stanovení adsorpční izotermy pomocí dusíku. Z této závislosti pak byl vypočten specifický povrch pomocí Langmuir a BET izotermy. Dále byla určena distribuce velikosti pórů pomocí BJH a DFT metody.

Práce byla podporována výzkumným projektem MŠMT ČR č. MSM 6046137301.

- [1] B. Doušová, et al., Modified aluminosilicates as low-cost sorbents of As(III) from anoxic groundwater, *J.Hazard.Mater.* 165 (2009) 135-140

[2] J. Rocha, J.M. Adams, J.Klinowski, The Rehydration of Matekaolinite to Kaolinite: Evidence from Solid-State NMR and Cognate Techniques, *J.Solid State Chemistry*, 89 (1990) 260-274

2Po24

SUSPENZNÍ PŘÍPRAVA PIGMENTŮ TYPU $BASn_{1-x}Tb_xO_{3\pm\delta}$

Petra Luňáková, Jana Luxová, Miroslav Trojan

Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Technologický pavilon, Doubravice 41, 532 10 Pardubice, ČR, petra.lunakova@student.upce.cz

V této studii se jedná o anorganický pigment na bázi Ba-Sn-Tb. Výchozími surovinami k přípravě pigmentů typu $BaSn_{1-x}Tb_xO_{3\pm\delta}$ jsou kromě SnO_2 také podvojný oxid terbia, kde se ionty terbia nacházejí ve dvou oxidačních stavech (tj. $2TbO\cdot Tb\cdot O$) a barnaté suroviny $BaCO_3$ ($BaSO_4$). Výsledný barevný odstín pigmentů pak závisí na obsahu jednotlivých složek, teplotě kalcinace a způsobu aplikace. Tyto pigmenty byly aplikovány do organického pojivového systému v plném i ředěném tónu a také do keramické glazury. Byla proměřena barevnost, velikost částic a provedena rentgenová analýza.

Suspenzní mísení surovin (SMS) představuje dvoustupňový proces. Z výchozích surovin je homogenizací připravena reakční směs, která je převedena do formy suspenze destilovanou vodou. Směs navíc obsahuje Na_2CO_3 , $C_4H_4O_4$, CH_4N_2O , které hrají v reakci velmi důležitou roli. Rozklad CH_4N_2O a $C_4H_4O_4$ v prvním stupni způsobuje nejen dokonalější proreagování reakčních komponent, ale také v důsledku rozkladu a uvolnění NH_3 a CO_2 zlepšuje následnou zpracovatelnost poloproduktu [1]. Navíc rozkladem CH_4N_2O vzniká mírná redukční atmosféra. Suspenze výchozích surovin a aditiv je v prvním stupni zpracovaná při teplotě 380–400 °C na tuhý produkt, který je po rozetření kalcinován na vyšší teplotu. Tato kalcinace představuje druhý stupeň SMS procesu.

Výzkum anorganických pigmentů je na pracovišti autorů podporován MSM č. 0021627501 a také IGA Univerzity Pardubice SGFCHT 04.

[1] Onda H., Takenaka A., Kojima K., Nariai H., *Materials Chemistry and Physics* 82 (2003) 194-195

2Po25

CÍNIČITÉ PIGMENTY S LANTHANOIDY

Petra Luňáková, Jakub Trojan, Miroslav Trojan, Jana Luxová

Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Technologický pavilon, Doubravice 41, 532 10 Pardubice, ČR, jakub-trojan@centrum.cz

Cíničité pigmenty patří do skupiny vysokoteplotních pigmentů. Patří sem i cíničité pigmenty typu kasiteritu [1]. Ty jsou založeny na oxidu cíničitém se strukturou minerálu kasiteritu. Znamé jsou celkem tři kasiteritové pigmenty. Jsou to kasiteritová žluť, kasiteritová orchidej a kasiteritová šed'. Tyto pigmenty se vyznačují vysokou termickou a chemickou stabilitou a mají hlavní použití v keramice. Především první z nich je velmi zajímavý, vzhledem ke svému žlutému barevnému odstínu. Pigmenty ve žlutém, oranžovém až červeném odstínu jsou v keramice velmi žádané, avšak jejich nabídka je vzhledem k současným ekologickým nárokům, velmi omezena. Řada vysokoteplotních pigmentů totiž musela být z praktických aplikací vyřazena [1]. Cíničité pigmenty těmito omezením naštěstí vyhovují, takže je na ně na pracovišti autorů soustředěna pozornost. Mimo jiné i na kasiteritovou žluť [2]. Zejména je studován vliv příměsí jednotlivých lanthanoidů. Ty byly v průběhu syntézy pigmentu vnášeny do jeho struktury. Cílem bylo ověřit případný vliv těchto příměsí na barevnost pigmentu. Vliv jednotlivých lanthanoidů byl různý. Některé lanthanoidy se ukázaly jako nevhodná příměs, jiné barevnost pigmentu příliš neovlivňovaly, ale některé ovlivňovaly barevnost pigmentu příznivě. Nejlepší výsledky přinesly příměsi lanthanoidů, které posouvaly žlutý barevný odstín pigmentu do odstínů žlutooranžových.

Výzkum anorganických pigmentů je na pracovišti autorů podporován MSM č. 0021627501 a také IGA Univerzity Pardubice SGFCHT 04.

[1] Mirek Novotný, Zdeňek Šolc, Miroslav Trojan: *Kirk-Othmer Enc. of Chem. Technology – Inorganic Pigments*, Vol. 19 (1996)

[2] Jakub Trojan: *Diplomová práce*, Univerzita Pardubice (2011)

2Po26**INTERAKCE NANOČÁSTIC OXIDU TITANIČITÉHO S BIOLOGICKÝMI SYSTÉMY**Libor Mastný¹, Zdeňka Kovářová¹¹ Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha

Oxid titaničitý byl všeobecně považován za chemicky inertní a netoxickou sloučeninu. Jako bílý pigment je široce používán a v EU je schválen jako aditivum neškodné pro lidský organismus - E 171 (Příloha směrnice 94/36/EC). Avšak v podobě nanočástic vykazuje škodlivé účinky již prokázané při testech *in vitro* a *in vivo* [1].

Na základě výsledků řady publikovaných studií je diskutována distribuce nanočástic v tkáních a možný mechanismus toxického působení na buněčné úrovni. Ve zmiňovaných studiích jsou nanočástice charakterizovány různými způsoby, což ztěžuje porovnávání toxického potenciálu částic.

Prezentovaná práce byla zaměřena na zpracování výsledků vybraných studií za účelem sledování toxicity nanočástic TiO₂ v návaznosti na jejich krystalickou modifikaci, velikost a tvar.

Práce vznikla v rámci projektu VZ MŠM 6046137302

[1] Yu-Lan Hu, Jian-Qing Gao: *Inter. J. Pharmaceutics* **394** (2010) 115-121**2Po27****PRÍRODNÉ A SYNTETICKÉ ŽELEZITÉ OXYHYDROXIDY Z KYSLÝCH BANSKÝCH VÝTOKOV**Branislav Máša¹, Petra Pulišová², Eva Michalková³, Ján Šubrt⁴^{1,3} Technická Univerzita vo Zvolene, Fakulta Ekológie a environmentalistiky, T. G. Masaryka 24, 960 53 Zvolen, Slovenská republika e-mail: michalkova.evka@gmail.com, branoma@azet.sk^{2,4} Ústav anorganické chemie AV ČR, v.v.i., 250 68 Husinec-Řež, Česká republika

Kyslé banské výtoky (AMD – acid mine drainage) sú silne kyslé sulfátové vody, ktoré obsahujú vedľa hlavných a primárnych produktov biooxidácie pyritu (H₂SO₄, Fe³⁺, Fe⁺²) aj iné solubilizované kovy v závislosti od zloženia depozitov sulfidických rúd. Práca je zameraná na charakterizáciu (XRD, SEM, TEM, BET) železitých oxyhydroxidov (Fe-O) prírodných, vznikajúcich za abiotických ale aj biotických

podmienok na miestach s depozitmi sulfidických rúd (odkalká, štôlne, apod.), a syntetických, pripravených frakčnou precipitáciou z AMD. Fázovú skladbu a morfológiu Fe-O ovplyvňuje hlavne hodnota pH a koncentrácia sulfátov v prostredí ich tvorby. Významnú úlohu, hlavne v prírodných podmienkach, hrá doba. Prírodné Fe-O rôznych lokalít Slovenska sú tvorené, vedľa amorfnej fázy, stabilnými slabými kryštalickými fázami goethitom a ferrihydritom. Morfológicky predstavujú tieto prírodné Fe-O agregáty submikroskopických častíc pórovitej štruktúry o mernom povrchu 150 – 250 m².g⁻¹. Produkty Fe-O z precipitácie/neutralizácie AMD s NaOH pri teplotách 20-60 °C sú tvorené nestabilnou fázou schwertmanitom, zatiaľ čo pri teplote 90 °C sa tvorila zmes schwertmanitu a goethitu. Homogénnou termickou precipitáciou AMD za použitia močoviny sa tvoria v závislosti od podmienok reakcie (teplota, pomer močovina : Fe) amorfné a nanokryštalické fázy goethit, schwertmannit, ferrihydrit a jarosit vo forme dobre filtrovateľných produktov. Agregáty submikroskopických čistých Fe-O častíc s významnými povrchovými vlastnosťami sa tvoria termickou hydrolyzou AMD s močoviny pri teplote 80 – 90 °C a 5 – 15 násobnom molárnom nadbytku močoviny.

Podakovanie: Príspevok je súčasťou riešenia projektov podporených MŠ SR a ČR (VEGA 1/0529/09, MEB 136) a agentúrou APVV (SK-CZ-0142-09).

2Po28**NOVÉ VRSTEVNATÉ FUNKCIONALIZOVANÉ FENYLFOSFONÁTY TITANIČITÉ**Klára Melánová¹, Ludvík Beneš², Jan Svoboda¹, Vítězslav Zima¹¹ Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6, Česká republika, klara.melanova@upce.cz² Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, 532 10 Pardubice, Česká republika

Mezi nejstabilnější fosfonáty kovů patří fosfonáty čtyřmocných kovů, především fosfonáty zirkoničité, které byly rozsáhle studovány zejména z hlediska jejich využití jako iontové vodiče, sorbenty nebo katalyzátory. Menší pozornost byla věnována fosfonátům titaničitým.

Nové vrstevnaté funkcionalizované fenylofosfonáty titaničité byly připraveny reakcí tetraisopropoxidu titaničitého s příslušnou

fenylfosfonovou kyselinou (4-karboxy-fenylfosfonovou, 4-sulfamoylfenylfosfonovou, 1,4-benzenedifosfonovou a 4-sulfofenylfosfonovou) a následnou hydrotermální nebo solvotermální reakcí při 180°C po dobu 60 hodin. Stejným způsobem byly připraveny smíšené fosfonáty obsahující vedle 4-sulfofenylfosfonátového aniontu fenylfosfonát, methylfosfonát nebo hydrogenfosforečnan. Připravené sloučeniny byly charakterizovány práškovou rentgenovou difrakcí, termogravimetrickou a elementární analýzou.

Na rozdíl od fenylfosfonátu titaničitého 4-substituované fenylfosfonáty obsahují v mezivrstevném prostoru vodu, jejíž množství závisí na relativní vlhkosti okolní atmosféry. Schopnost substituovaných fenylfosfonátů titaničitých obsahujících kyselou skupinu interkalovat bazické látky byla testována jednak titrací roztoky hydroxidu sodného a hexylaminu jednak reakcí s přebytkem alifatických aminů a diaminů. Byla měřena iontová vodivost 4-sulfofenylfosfonátu titaničitého v teplotním rozsahu -5 až 60°C.

Tato práce vznikla za finanční podpory GA ČR (grant číslo 203/08/0208).

2Po29

STUDIE REDOX OBLASTÍ V GERDIENOVÉ OBLOUKU

Linda Mišková¹, Libor Mastný¹, Vlastimil Brožek²

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

² Ústav fyziky plazmatu AV ČR, Za Slovankou 3, 182 00 Praha 8 Brožek@ipp.cas.cz

Princip generování plazmatu v kapalném prostředí je znám od roku 1922 (Gerdien a Lotz), praktické využití se datuje od r.1953 [1]. Unikátní konstrukční jednotkou je generátor vodou stabilizovaného plazmatu WSP®, který při příkonu 150 kW produkuje plazma o teplotě až 30000 K s výtokovou rychlostí až 900 m/s [2]. Tyto dva faktory významně ovlivňují primární interakci plazmatu s okolním prostředím především účinkem vysoké turbulence a následně pak interakci tohoto ionizovaného prostředí s látkami, které v proudu plazmatu chceme chemicky nebo tepelně zpracovávat. V prostředí kyslík – dusík – vodní pára vzniká kombinatorická řada až 15 různých radikálů a volných elektronů v koncentracích od 10¹² do 10¹⁹ částic v 1 cm³, které při rekombinaci v kuželovém

prostoru objemu cca 0,01 m³ oxidují nebo redukují vnášené reaktanty. Průzkum oxidačně-redukčních vlastností plazmatu v tomto prostoru byl realizován pomocí titanového prášku a titanových folií, vyznačujících se vysokou afinitou ke kyslíku a dusíku. Rentgenovou difrakcí a zejména Ramanovou spektrometrií v jednotlivých mikroblastech byly lokalizovány podmínky vzniku nitridů a nižších oxidů titanu. Paramagnetické vlastnosti atomárního dusíku ovlivňují produkci TiN ve střední osově části plazmatu, v okrajových částech dochází k oxidaci přes Ti₂O₃ až na TiO₂, který s místě nejvyšší teploty termicky disociuje a vzniká modrý produkt deficitního rutilu TiO_{1,9}.

[1] Gage R.M., US Patent No.2,806,124 (1953)

[2] Chráška P., Hrabovský M., Water Stabilized Plasma Guns and Their Applications, Proc.ITSC 92, Orlando Fl. USA, June 1992, p. 81

2Po30

INTRODUCTION OF NOVEL N,O-CHELATING LIGAND INTO THE TIN CHEMISTRY

Martin Novotný¹, Aleš Růžička¹

¹Department of General and Inorganic chemistry, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentská 573, CZ-532 10, Pardubice, Czech Republic, martin.novotny1@student.upce.cz

Chelating ligands are nowadays very popular in coordination and organometallic chemistry for stabilizing low oxidation states of metals and unstable species.¹ During last few decades a number of these species was prepared (Fig. 1).

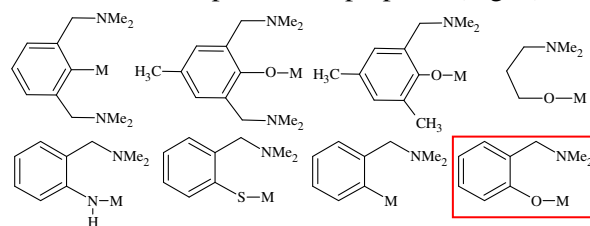


Fig. 1: Examples of various chelating ligands

Our current work is focused on the reactivity and spectral characterization of tin(II), germanium(II), lead(II) and tin(IV) compounds containing 2-[(dimethylamino)methyl]phenol (HL^{NO}; highlighted in Fig. 1). In the first step HL^{NO} was treated with *n*BuLi, KO^tBu or NaH, respectively, to prepare corresponding alkali metal phenolates.² Tin compounds with this type of ligands can serve as potential catalysts in homogenous polyurethane foams preparation.³

All prepared compounds were characterized by multinuclear NMR spectroscopy.

The authors would like to thank the Czech Science Foundation (grant nr. P207/10/0215) for the financial support.

- [1] Morales, D.; Jensen, C.; The Chemistry of Pincer Compounds **2007** Elsevier Science B.V..
 [2] Schaaf, P. A.; Jastrzebski, J. T. B. H.; Hogerheide, M. P.; Smeets, W. J. J.; Spek, A. L.; Boersma, J.; Koten, G.; Inorg. Chem. **1993**, 32, 4111-4118.
 [3] Chernov, O. V.; Smirnov, A. Y.; Portnyagin, I. A.; Khrustalev, V. N.; Nechaev, M. S.; J. of Organomet. Chem. **2009**, 694, 3184-3189.

2Po31

KORÓZIA ZLIATINY INCOLOY 800H/HT

Viliam Pavlík¹, Ľubomír Koleda¹, Anna Jurová²

Ústav anorganickej chémie,¹ Oddelenie taveninových sústav, ² Oddelenie keramiky, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava 45, viliam.pavlik@savba.sk

Reaktory s roztavenými soľami (MSR) [1] umožnili vznik rýchlych množivých reaktorov s rozpustenými fluoridmi. Ako materiál pre tieto reaktory sa optimalizovali zliatiny Incoloy 800, Hastelloy N, Inconel 600, Haynes 230 a podobne [2]. Ich pomalé rozpúšťanie v koróznom médiu vyžaduje priebežné čistenie zmesi, kde vzniká potenciálny zdroj odpadu.

V práci sa sledoval hmotnostný úbytok zliatiny Incoloy 800H/HT (48%Fe–29%Ni–20%Cr) v koróznom eutektickom médiu s názvom FLINAK (46,5%LiF–11,5%NaF– 42%KF) a v zmesi LiCl–KCl (1:1). Povrch sa analyzoval pomocou SEM-EDX analýzy. Ohrev prebiehal 8 hodín pri rôznych teplotách vo vertikálnej rúrkovej peci v atmosférach dusíka, argónu a vzduchu.

Zo získaných výsledkov vyplýva, že hmotnostný úbytok relatívne nepatrne rastie so zvyšujúcou sa teplotou a prudko rastie s obsahom kyslíka, v našom prípade chloridová zmes >FLINAK>Ar>N₂>vzduch. Prednostne dochádzalo k uvoľňovaniu chrómu do FLINAKu, čo bolo potvrdené rtg. analýzou a korešponduje s literatúrou [3]. Bez použitia korózneho média dochádzalo prednostne k oxidácii železa a ku značnej optickej degradácii zliatiny. Z uvedeného vyplýva, že zliatina si v použitých soliach dobre zachováva svoju koróznou odolnosť. Deje sa to pravdepodobne vplyvom vytvorenia rovnováhy úbytkom chrómu zo zliatiny do soli. Tu sa vytvára ďalšie pole výskumu FLINAK-zliatina rôznymi prídavkami chromitých a iných solí do korózneho média.

Táto práca bola podporovaná grantovou agentúrou Vega 2/0058/09.

Príspevok /publikácia/ bol/a vytvorený/á realizáciou projektu Centrum pre Materiály, vrstvy a systémy pre Aplikácie a Chemické procesy v extrémnych podmienkach – Etapa II na základe podpory operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja.

- [1] U.S DOE Nuclear Energy Research Advisory Committee and Generation IV International Forum, (2002)
 [2] Sohal M. S. et.al.: Engineering Database of Liquid Salt, (2010)
 [3] Olson L. Ch.et.al.: Journal of Fluorine Chemistry, (2009), 130, 67-73

2Po32

PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE MATERIÁLŮ V OXIDOVÉM SYSTÉMU M-Bi-Ta (M= Ca, Sr, Ba), JAKOŽTO POTENCIÁLNÍCH BEZOLOVNATÝCH PIEZOELEKTRIK

Jiří Plocek¹, Zdeněk Kváča², Václav Matz³, Přemysl Vaněk⁴

¹Ústav anorganické chemie AV ČR, v.v.i., Husinec-Řež 1001, 25068 Řež, Česká republika, plocek@iic.cas.cz

²Molecular cybernetics, s.r.o., Strážovská 65/7 15000 Praha 5, Česká republika

³Starmans electronics, s.r.o., V zahradách 836/24, 18000 Praha-Libeň, Česká republika

⁴Fyzikální ústav AV ČR, v.v.i., Na Slovance 2, 18221 Praha, Česká republika

V rámci výskumu priprav vrstevnatých piezoelektrik využitelných pro realizaci vysokoteplotních ultrazvukových měničů byly připraveny a studovány některé materiály patřící do ternárních oxidových systémů M-Bi-Ta, kde M=Ca, Sr a Ba. Připravené MBi₂Ta₂O₉ a M₂BiTaO₆ byly charakterizovány pomocí RTG, DSC, SEM a následně u nich bylo studováno jejich elektroakustické chování.

Práce vznikla za finanční podpory MPO projektu 2A-ITP1/092.

2Po33

PŘÍPRAVA NANO-STRUKTURNÍ PĚNY
OXIDU TITANIČITÉHO

Petra Pulišová¹, Eva Kleinová¹, Petr Svora¹,
Jaroslav Boháček¹, Petr Bezdička¹, Monika
Maříková¹, Jan Šubrt¹

¹Ústav anorganické chemie AV ČR, v.v.i., Husinec-Řež
č.p. 1001, 250 68 Řež, Česká republika
pulisova@iic.cas.cz

Oxid titaničitý je významný materiál široce využívaný jako bílý pigment, složka různých katalyzátorů nebo fotokatalyzátorů, solárních článků, na výrobu vodíku a senzorů, elektrodových materiálů pro Li baterie a v řadě dalších aplikací [1-3]. Tato sloučenina je chemicky stabilní, netoxická, dostatečně levná a nezpůsobuje ekologické nebezpečí. Rozsáhlé úsilí se věnuje hlavně aplikacím fotokatalýzy, jako čištění vzduchu a vody, samočisticím materiálům a vrstvám a rozvoji antibakteriálních povrchů. Pro praktické využití této sloučeniny je, vedle chemické čistoty a fázového složení, zásadně významná i textura materiálu. Z tohoto hlediska má zvláštní postavení forma pěny oxidu titaničitého s nízkou sypanou vahou (1-10 g.dm⁻³), která je typická vysokou porozitou a vysokou průchodností pro plynnou fázi, vysokou sorpční schopností a v důsledku toho i vysokou fotokatalytickou aktivitou.

Předmětem příspěvku je způsob přípravy pěny TiO₂ s velmi nízkou sypanou vahou z peroxotitaničitých gelů, připravených reakcí peroxidu vodíku se suspenzí hydratovaného oxidu titaničitého ve vodě a následným vymrazováním. Nedávno byla metoda vymrazování prozkoumána jako jedinečná cesta na výrobu nových typů porézních materiálů.

Autoři děkují za finanční podporu Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy, projekt NANOPIN (1 M4531477201) a agentuře APVV (grant SK-CZ-0142-09).

- [1] Braun, J. H., Baidins, A., Marganski, R. E.: TiO₂ pigment technology - a review, *Progress in Organic Coatings*, 1992, **20**, 105-138.
- [2] Gesenhues, U.: Calcination of metatitanic acid to titanium dioxide white pigments, *Chemical Engineering & Technology*, 2001, **24**, 685-694.
- [3] Yanagida, S., Yu, Y. H., Manseki, K.: Iodine/Iodide-Free Dye-Sensitized Solar Cells, *Accounts of Chemical Research*, 2009, **42**, 1827-1838.

2Po34

TRANSITION METAL COMPLEXES WITH
9-DEAZAHYPOXANTHINE

D. Rak, Z. Trávníček

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

3H,5H-pyrrolo-[3,2-d]pyrimidin-4-one (9-deazahypoxanthine, L) is an important precursor in the synthesis of C6, N7 and/or C9 substituted 9-deazapurines, powerful inhibitors of enzymes involved in the metabolism of purine nucleobases. Due to their significant activity, 9-deazapurines have been considered as prospective drugs against cancer and autoimmune diseases [1, 2]. The use of 9-deazapurines as ligands for the preparation of potentially highly effective transitional metal based anticancer drugs was the major reason to study transition metal-L interactions.

This work has been focused on the synthesis, characterization and biological study of 9-deazahypoxanthine complexes with some transition metals, notably copper, zinc and platinum. Several Cu(II), Zn(II) and Pt(II) compounds with the composition [Cu(L)₂Cl₂], [Cu(L)₂(NO₃)₂], [Zn(L)Cl₂]_n, (H⁺L)₂[ZnCl₄], [M₂(L)₂(μ-SO₄)₂(H₂O)₆] (M = Zn, Cu) and [Pt(L)₂Cl₂], [Pt(L)₂(ox)] have been synthesized and characterized by elemental analysis, FT-IR spectroscopy, ESI mass spectrometry, magnetic and TG/DTA measurements, and single crystal X-ray analysis. X-ray studies revealed the preferred N3 and μ-N3,O1 coordinations of 9-deazahypoxanthine (L) to the transition metal (see Fig.1). The anticancer properties of the selected complexes have been studied *in vitro* on the HOS and MCF7 human cancer cell lines. Copper(II) complexes have been also tested for their SOD-like activity.

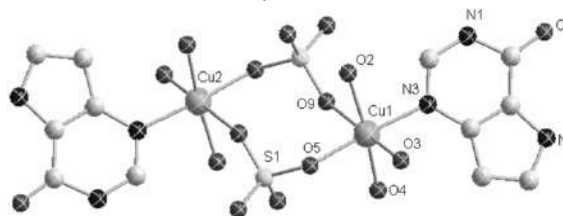


Fig. 1. Molecular structure of [Cu₂(L)₂(μ-SO₄)₂(H₂O)₆]

This research was supported by the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (MSM6198959218), Internal Grant Agency of Palacký University (PřF_2011_014), the Operational Program

Research and Development for Innovations – European Social Fund (CZ.1.05/2.1.00/03.0058) and the Operational Program Education for Competitiveness - European Social Fund (CZ.1.07/2.3.00/20.0017).

- [1] Otmar M., Masojídková M., Votruba I. and Holý A., *Bioorg. Med. Chem.*, 12 (2004), 3187–3195.
 [2] Bantia S., Miller P. J., Parker C. D. et al., *Int. Immunopharmacol.* 1 (2001), 1199–1210.

2Po35

SPEKTROSKOPICKÉ CHARAKTERISTIKY GEOPOLYMERŮ NA BÁZI GRANULOVANÉ VYSOKOPECNÍ STRUSKY A POPÍLKU, IDENTIFIKACE CSH FÁZE V TĚCHTO MATERIÁLECH

Lucie Ruppenthalová¹, Petr Martinec¹

¹Ústav geoniky AV ČR, v.v.i., Studentská 1768, 708 00 Ostrava, lucie_ruppenthalova@centrum.cz

Cílem práce bylo zjistit spektroskopické charakteristiky geopolymerních materiálů vzniklých alkalickou aktivací směsi granulované vysokopecní strusky a popílku. Infračervená analýza s Fourierovou transformací (FTIR) byla provedena KBr tabletovou technikou na vzorcích bez tepelného namáhání a vzorcích vypálených na 100-1000°C po dobu 3 hodin. Na vybraných oblastech spektra byla provedena dekonvoluce. Problémem, který doprovázel IRS analýzu, byla identifikace CSH fáze (kalcium-silikát-hydrát), která je v materiálu předpokládána a cíleně úpravou složení směsi modelována. Jednoznačně identifikovat příslušnou CSH fázi nebylo pomocí FTIR možné. Z toho důvodu byla provedena ²⁷Al MAS NMR a ²⁹Si MAS NMR.

Dekonvoluce FTIR spektra potvrdila, že se ve směsi do teploty 500°C vytvářela struktura se zárodky zeolitové fáze (3477, 985, 455, 399 cm⁻¹). Při vyšších teplotách nad 500°C se struktura začala měnit a probíhal postupně vznik „pseudowollastonitové“ fáze, která se projevila až okolo 700°C. Při teplotě 1000°C se spektrum blíží wollastonitu.

U spekter ²⁹Si MAS NMR [1] mají stejnou rezonanci Q2 kolem hodnoty -84 ppm a v jednom případě slabou rezonanci odpovídající Q4 = -10,7 ppm, což odpovídá CSH fázi. [2,3]

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR reg. č. 106/09/0588

- [4] Tomková, V. et. al.: Závěrečná zpráva ke grantu GAČR č. 106/09/0588, 2011.
 [5] Cong, X.D., Kirkpatrick, R.J.: ²⁹Si and ¹⁷O NMR investigation of the structure of some crystalline

calcium silicate hydrates, *Advanced Cement Based Materials* 3, 1996, 133.

- [6] Cong, X.D., Kirkpatrick, R.J.: ²⁹Si MAS NMR study of the structure of calcium silicate hydrates, *Advanced Cement Based Materials* 3, 1996, 144.

2Po36 AMINOMETHYLPHOSPHONATE COMPLEXING PROPERTIES TO Zn(II) IN AQUEOUS SOLUTION AND SOLID STATE

Ingrida Rostášová¹, Zuzana Vargová¹, Róbert Gyepes^{2,3}, Katarína Györyová¹, P. Hermann⁴, I. Lukeš⁴

¹Department of Inorganic chemistry, Institute of Chemistry, University of P. J. Šafárik, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovak Republic, ingrida.rostasova@student.upjs.sk

²Faculty of Pedagogy, University of J. Selye, Bratislavská cesta 3322, 945 01 Komárno, Slovak Republic

³J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry, Academy of Science of the Czech Republic, v.v.i., Dolešková 3, 182 23 Praha, Czech Republic⁴

⁴Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, Charles University, Hlavova 2030, 128 40 Praha, Czech Republic

Phosphonates are phosphorus analogues of aminoacids. They contain one or more R-PO(OH)₂ groups, have a good chemical stability and are soluble in water. Phosphonates can be applied in many areas such as ion exchange, photochemistry, oil production, corrosion inhibition or material chemistry [1]. They have a good biological activity too. They are used by treatment several diseases like post menopausal osteoporosis, tumor-associated bone loss or Paget diseases. Aminomethylphosphonates, a group of phosphonates, have chemical properties which enable them to coordinate either over amino or phosphonate group, so they appear as bidentate ligand [2]. In solid state they occur as zwitterion NH₃⁺CH₂PO₃H⁻. Biological properties of these compounds can be increased by coordination of metal ion. The most interesting metals for studying their biological activity are platinum, zinc, copper or iron. They are used for treatment various antibacterial diseases. Herein we report complexing properties of aminomethylphosphonate to Zn(II) in aqueous solution and solid state.

The financial support of bilateral contract between the Czech Republic and the Slovak Republic (SK-CZ-0120-09) is gratefully acknowledged.

[1] A. Clearfield, in K.D.Karlin(Ed.), Progress in Inorganic Chemistry, Wiley, New York, 1998 (and references therein)

[2] B.C. Barja, J. Herszage and M. dos Santos Afonso, Polyhedron 20 (2001) 1821-1830

2Po37

CHARAKTERIZACE POVRCHOVÝCH VLASTNOSTÍ VYBRANÝCH POLYMERŮ

Alena Řezníčková¹, Zdeňka Kolská², Václav Švorčík¹

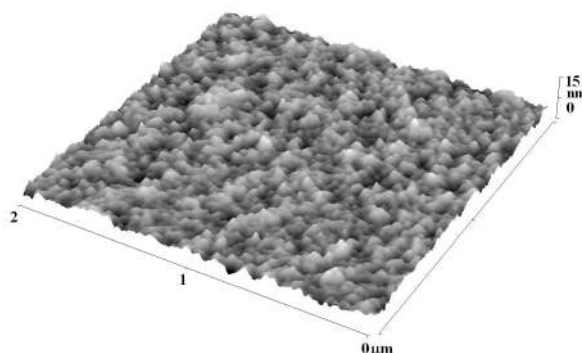
¹Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická Praha, Technická 5, 16628 Praha 6, reznicka@vscht.cz

²Katedra chemie, UJEP vÚstí n. L., 40096 Ústí n. Labem

Polymery v dnešní době nacházejí široké spektrum využití a to díky svým vynikajícím objemovým vlastnostem (tj. nízká hustota, flexibilita, mechanická a elektrická odolnost, chemická odolnost)[1]. Obecně však vlastnosti povrchu polymerních materiálů nedosahují požadované kvality pro další zpracování. V mnoha aplikacích jsou požadovány speciální povrchové úpravy co do chemického složení, schopnosti smáčet, drsnosti, vodivosti konkrétního zpracovávaného polymeru [2,3]. Pro využití polymerů v oblasti biomateriálů, ochranných povlaků, oděvního ale i elektronického průmyslu je také důležité znát jejich povrchové vlastnosti.

Tato práce se zabývá charakterizací povrchů nízkohustotního a vysokohustotního polyethylenu (PE), polyimidu (Kapton), polyvinylfluoridu (PVF) a polyvinylidenfluoridu (PVDF). Smáčivost a povrchová polarita původních substrátů byla studována pomocí goniometrie. K charakterizaci chemie povrchu polymerů bylo využito zeta potenciálu. Morfologie a mikrostruktura vybraných substrátů byla studována pomocí mikroskopie atomárních sil (AFM) a optického polarizačního mikroskopu. Na základě goniometrického měření bylo zjištěno, že nejmenší smáčivost vykazuje povrch vysokohustotního polyethylenu a naopak největší smáčivost byla potvrzena u polyimidu Kapton. Pomocí polarizačního mikroskopu byla zjištěna vláknitá struktura vysokohustotního polyethylenu v porovnání s nízkohustotním polyethylenem. U vysokohustotního polyethylenu byla také zjištěna vyšší povrchová drsnost než u nízkohustotního polyethylenu. Z AFM měření také vyplývá, že nejvyšší povrchovou drsnost (PE) vykazuje i

(PVDF) naopak nejnižší drsnost vykazuje polyimid (Kapton).



Obr. 1 AFM sken polyimidu Kapton (PI)

Tato práce vznikla za podpory grantů A2 FCHT 2011 005, AS CR KAN 400 480701 a GACR 106/090/125.

- [1] J. Siegel, A. Řezníčková, A. Chaloupka, P. Slepíčka, V. Švorčík, Radiat. Eff. Defects S. 2008, 163 (2008) 779.
 [2] C.M. Chan, T.M. Ko, H. Hiraoka, Surf. Sci. Rep. 24 (1996) 3.
 [3] J.M. Grace, J.L. Grenser, J. Dispers. Sci. Technol. 24 (2003) 305.

2Po38

DFT STUDY OF MONTMORILLONITE INTERCALATED WITH TMA⁺.

Eva Scholtzová¹, Daniel Tunega², Lubomír Benco³, Helena Pálková¹

¹Dept of theoretical chemistry, Institute of Inorganic Chemistry of Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, Slovakia

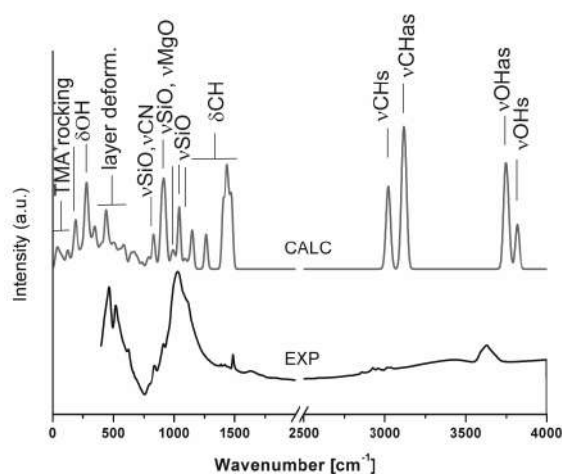
²Universität für Bodenkultur, Institut für Bodenforschung, Peter-Jordan-Strasse 82b, Wien 1190, Austria

³Fakultät für Physik and Center for Computational Materials Science, Universität Wien, Sensengasse 8/12, A-1090 Wien, Austria

Organoclays are perspective materials, e.g. for preparation of nanocomposites. The properties of these materials can be controlled by a type of intercalated cation, therefore, it is important to know how organocations are distributed and oriented in the interlayer space of clays. Molecular modeling can help in a characterization of the organoclays.

Density functional theory (DFT) based method (VASP program [1]) was used in a study of montmorillonite intercalated with tetramethylammonium cation (TMA-M). A TMA-M model was prepared on the base of montmorillonite structure according Tsipurski and Drits [2]. The calculated d_{001} distance (13.91 Å) agrees well

with experimental value of 14.1Å. The calculated hydrogen bonds show that the TMA⁺ is keyed into interlayer space of montmorillonite by weak C-H...O hydrogen bonds (H...A: 2.5-2.7Å, D...A: 3.5-3.7Å, and D-H...A angles: 147-160°. TMA⁺ is connected with a layer surface through three methyl groups while the fourth stays free. The participation of the methyl groups in the hydrogen bonding results in the red shift of frequencies of the C-H stretching vibrations. The comparison with calculated frequencies of the isolated TMA⁺ showed that the red shift is ~30cm⁻¹. The calculated spectrum of the TMA-M model is compared with experimentally measured IR spectrum in Fig 1.



The financial support for this research by the Slovak Research and Development Agency (Projects APVV 0362-10 and SK-AT-0020-10) is gratefully acknowledged.

- [1] Kresse, G. and Hafner, J., 1993, Phys Rev, B48, 13115-13118.
 [2] Tsipurski S.I. and Drits V.A. Clay Miner. 1984, 19, 177-193.

2Po39 TEPLOTNÍ STABILITA Au NANOVRSŤEV

Jakub Siegel¹, Robert Krajcar¹, Ondřej Kvítek¹, Václav Švorčík¹

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

V posledních dvou dekádách nastávajícího tisíciletí jsme svědky nového fenoménu v oblasti výzkumu a vývoje materiálů s ojedinělými vlastnostmi. Stále častěji se ukazuje, že pro výrobu materiálů se zcela výjimečnými vlastnostmi již zdaleka není zásadní pouze jejich chemické složení, ale především také rozměry jejich základních stavebních bloků [1,2]. Užité hodnota materiálů “šitých na míru” z pohledu

velikosti základních stavebních jednotek spočívá ve zcela novém rozsahu jejich aplikací [3].

Práce studuje vybrané fyzikálně-chemické vlastnosti ultratenkých Au vrstev připravených metodou katodového naprašování na oxidickém a polymerním substrátu. Au vrstvy byly následně teplotně namáhány a byla vyšetřována jejich elektrická a materiálová spojitost, optické vlastnosti a povrchová morfologie.

Práce ukázala, že ke změnám fyzikálně-chemických vlastností Au vrstev dochází bez ohledu na použitý substrát, zejména vzhledem k jeho povrchové drsnosti, chemickému složení či tuhosti. K dramatické změně povrchové morfologie Au dochází již při žíhacích teplotách kolem 300°C, což je u objemového zlata jev nepozorovaný. Změna povrchové morfologie má vliv i na další vlastnosti tenkých vrstev. UV-Vis spektra vrstev, jejichž efektivní tloušťka byla < 20 nm vykazují pás povrchové plazmonové rezonance. Využitím Taucova vztahu byla následně vypočtena šířka optického zakázaného pásu. Jeho nenulová hodnota v oboru efektivních tloušťek 2 – 20 nm nasvědčuje polovodivému charakteru vrstev.

Tato práce vznikla za podpory grantů GA CR 108/11/P337 a 108/10/1106.

- [1] C.N.R. Rao, G.U. Kulkarni, P.J. Thomas, P.P. Edwards, Chem. Eur. J. 8, 29-35 (2002)
 [2] E. Roduner: Chem. Soc. Rev. 35, 583-592 (2006)
 [3] P. Žvátora, P. Řezanka, V. Prokopec, J. Siegel, V. Švorčík, V. Král, Nanoscale Res. Lett. 6, 366-371 (2011)

2Po40 INTERAKCE PLAZMATU S POVRCHEM POLYMERNÍCH SUBSTRÁTŮ

Petr Slepíčka¹, Eliška Stránská¹, Simona Trostová¹, Zdeňka Kolská², Nikola Slepíčková Kasálková¹, Petr Sajdl³, Václav Švorčík¹,

¹Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, 166 28, Praha, Česká Republika, petr.slepicka@vscht.cz

²Katedra chemie, Univerzita J.E. Purkyně, České Mládeže 8, Ústí nad Labem, 400 96

³Ústav energetiky, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, 166 28, Praha, Česká Republika

V této práci je studován vliv plazmatické expozice na povrchovou morfologii a smáčivost polymerů, stárnutí povrchu polymerů po expozici plasmou s následným využitím pro roubování Au a Ag nanočástic a dalších bioaktivních sloučenin

za účelem zvýšení biokompatibility polymeru. Zkoumán byl vysokohustotní polyetylen (HDPE), polyethylentereftalát (PET), polytetrafluorethylen (PTFE), kyselina polymléčná (PLLA) a polymethylpenten (PMP).

Polarita (smáčivost) povrchu a jeho změny vlivem plazmatické modifikace byla studována goniometricky sledováním kontaktního úhlu, měřením povrchové energie a pomocí stanovení zeta-potenciálu. Morfologie povrchu byla studována metodou AFM. Tloušťka ablatované vrstvy byla stanovena gravimetricky. Chemická struktura modifikovaných polymerů byla studována pomocí metody XPS. Úbytek hmotnosti byl studován gravimetricky.

Plazmatická modifikace má za následek nárůst polaritu povrchu, s rostoucí dobou stárnutí se polarita v závislosti na použitém výkonu a době modifikace snižuje. V průběhu stárnutí se kontaktní úhel zvyšuje, klesá smáčivost v důsledku přeorientování povrchových funkčních skupin do objemu polymeru. Po určité době, která je charakteristická pro daný polymer, dojde k ustálení hodnoty kontaktního úhlu a smáčivosti. Během expozice docházelo k ablaci povrchu polymerů. S rostoucím výkonem a dobou modifikace se zvětšuje tloušťka ablatované vrstvy. Modifikace plazmatem indukuje vznik kyslíkatých skupin na povrchu polymeru. Plazmatická expozice vybraných polymerů má příznivý vliv na buněčnou proliferaci.

Autoři děkují za finanční podporu grantům GAČR č. 106/09/0125, 108/10/1106 a 106/09/P046; grantu č. LC 06041 a ASCR č. KAN200100801.

2Po41

KOVOVÉ NANOČÁSTICE NA PE PRO TKÁŇOVÉ INŽENÝRSTVÍ

Nikola Slepíčková Kasálková¹, Silvie Rimpelová¹, Petr Slepíčka¹, Lucie Bačáková², Václav Švorčík¹

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

²*Fyziologický ústav AV ČR, Vídeňská 1083, 142 20 Praha 4*

Pro využití polymerních materiálů v medicíně a biotechnologiích je důležité znát jejich interakci s buňkami. V současné době jsou pro svoje široké uplatnění v mnoha technologických a biologických oborech hojně zkoumány kovové nanočástice.

V této práci byl studován vliv kovových (zlatých a stříbrných) nanočástic na biokompatibilitu polyetylen (PE). Nejprve byl povrch PE byl ozářen plazmatem. Poté byly na chemicky aktivní povrch z roztoku vázány zlaté resp. stříbrné nanočástice. Složení a struktura upraveného povrchu PE byly studovány pomocí mikroskopie atomárních sil (AFM) a rentgenové fotoelektronové spektroskopie (XPS). Změny ve smáčivosti povrchu byly stanoveny na základě goniometrických měření. Biokompatibilita (buněčná interakce) byla testována metodou *in vitro*.

Bylo zjištěno, že působením plazmatu a navázáním nanočástic dochází k výrazným změnám v povrchové morfologii, drsnosti i povrchové smáčivosti. Z *in vitro* testů plyne, že vlivem modifikace povrchu dochází k významným změnám v atraktivitě povrchu PE pro buňky.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR číslo projektu 106/09/P046.

2Po42

ADSORPCE NANOČÁSTIC STŘÍBRA NA UHLÍKATÝCH AEROGELECH

Petr Slovák¹, Libor Kvítek¹, Aleš Panáček¹, Robert Pucek¹, Václav Slovák²

¹*Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci,*

Tř. Svobody 26, 771 46 Olomouc, Petslo@seznam.cz

²*Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita v Ostravě, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava, vaclav.slovak@osu.cz*

Nanočástice stříbra patří mezi jeden z nanomateriálů, který našel komerční uplatnění. Mají totiž unikátní optické a katalytické vlastnosti, ale především je důležitá jejich biologická aktivita. V dnešní době se nanočástice stříbra nejčastěji připravují redukcí stříbrné soli vhodným činidlem za přítomnosti dalších látek, které ovlivňují výsledný tvar, velikost a stabilitu vzniklých nanočástic. Mezi takovéto metody patří metoda založená na Tollensově reakci. Jedná se o časově nenáročnou a dobře reprodukovatelnou metodu, jejímž základem je redukce komplexního kationtu $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$ redukujícími cukry [1]. Výsledkem bývají nanočástice o velikosti kolem 25 nm s koncentrací kolem 100 mg/l. Manipulovatelnost s tak malými stříbrnými nanočásticemi lze bez ztráty jejich biologické aktivity zvýšit vytvořením jejich kompozitu s uhlíkatými materiály, například

s uhlíkatými aerogely. Uhlíkaté aerogely se připravují reakcí resorcinolu s formaldehydem za kyselých [2], popřípadě bazické katalýzy [3]. Jedná se o materiály, které se vyznačují dvěma typy pórů – mikropóry a mezopóry. Velikost povrchu se pohybuje většinou mezi 100 – 1500 m²/g, v závislosti na podmínkách během přípravy. Bazicky katalyzované uhlíkaté aerogely jsou výrazně tvrdší a mají výrazně větší povrch než kyselé katalyzované uhlíkaté aerogely. Z již dosažených výsledků vyplývá, že bazicky katalyzované uhlíkaté aerogely jsou schopny sorbovat větší množství nanočástic stříbra na svůj povrch než jejich kyselé katalyzované protějšky.

Tato práce byla podpořena projekty OP VaVpI reg. číslo CZ.1.05/2.1.00/03.0058, MŠMT ČR MSM6198959218 a MSM6198959223, GAČR GAP304/10/1316 a vnitřním grantem UP Olomouc PrF_2011_020.

- [1] L. Kvítek, R. Prucek, A. Panáček, R. Novotný, J. Hrbáč, R. Zbořil: *J. Mat. Chem.* 15, 1099 (2005)
 [2] Michael Reuß, Lorenz Ratke: *J Sol-Gel Sci Technol* (2008) 47:74–80
 [3] M. Wiener et al.: *Journal of Non-Crystalline Solids* 350 (2004) 126–130

2Po43

EPITAXNÍ RŮST GAN:MN VRSTEV METODOU MOVPE

Josef Stejskal¹, Zdeněk Sofer¹, David Sedmidubský¹, Filip Šaněk¹, Štěpán Huber¹, Miroslav Maryško², Jiří Hejtmánek², Karel Jurek², Martin Mikulics³

¹Ústav anorganické chemie, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika
 zdenek.sofer@vscht.cz

²Fyzikální ústav AVČR, v.v.i., Cukrovarnická 10/112, 162 00 Praha 6, Česká republika

³Institute of Bio- and Nanosystems, Forschungszentrum Jülich, D-52425 Jülich, Německo

Nitrid gallitý v současnosti nachází velmi široké uplatnění v moderní mikroelektronice a optoelektronice. V případě dotace d- a f- prvky bylo pozorováno feromagnetické chování při teplotách nad 300 K. [1, 2]. Tato vlastnost je velmi důležitá pro aplikační využití ve spintronice, kde dochází k přenosu informace nikoliv proudem elektronů, ale změnou jejich spinu.

Epitaxní vrstvy GaN:Mn byly deponovány v horizontálním křemenném reaktoru, Nosným plynem byla směs dusíku a vodíku. Prekurzorem gallia a manganu bylo trimethylgallium a bis(methylcyklopentadienyl) mangan. Jako zdroj

dusíku byl použit amoniak. Depozice byla prováděna na safírových substrátech orientace (0001). Byl studován zejména vliv tloušťky mezivrstvy nedotovaného GaN na výsledné vlastnosti (povrchovou morfologii, strukturní kvalitu, magnetismus).

Povrchová morfologie epitaxních vrstev byla charakterizována pomocí optické mikroskopie s DiC, AFM a SEM. Koncentrace manganu byla zjišťována elektronovou mikrosoudou a hloubkové koncentrační profily byly měřeny metodou SIMS. Strukturní kvalita vrstev byla studována pomocí rtg. difrakce a Ramanovy spektroskopie. Magnetické vlastnosti byly měřeny pomocí SQUID v teplotním rozsahu 5 K – 300 K.

Tato práce vznikla za podpory GAČR (projekt č. 104/09/0621) a Ministerstva Školství ČR (projekt č. MSM6046137302).

- [1] Jiří Hejtmánek, Karel Knížek, Miroslav Maryško, Zdeněk Jiráč, David Sedmidubský, Zdeněk Sofer, Vladislav Peřina, Hilde Hardtdegen, Christoph Buchal, *J. Appl. Phys.*, 103 (2008) 07D107
 [2] Zdeněk Sofer, David Sedmidubský, Josef Stejskal, Jiří Hejtmánek, Miroslav Maryško, Karel Jurek, Michal Václavů, Vladimír Havránek, Anna Macková, *J. Cryst. Growth*, 310 (2008) 5025

2Po44

ŠTÚDIUM ZLÚČENÍ KRYŠTALIZUJÍCICH ZO SÚSTAV Cu2+-BAPED-[M(CN)4]2 (BAPED = N,N'-BIS(3-AMINOPROPYL)-1,2-DIAMINOETÁN, M = Ni, Pd)

Monika Stolárová¹, Juraj Černák¹, Erik Čižmár², Milagros Tomás³, Larry R. Falvello³

¹Katedra anorganickej chémie, Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11, 041 54 Košice, SR, monika.stolarova@student.upjs.sk

²Ústav fyzikálnych vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Park Angelinum 9, 041 54 Košice, SR

³University of Zaragoza -C.S.I.C., Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón, Departamento de Química Inorgánica, E-50009 Zaragoza, Spain

Vodíkové väzby predstavujú alternatívnu výmennú cestu pre magnetické interakcie a ich dôsledkom je odlišná štruktúrna a magnetická rozmernosť študovaných látok [1]. V nadväznosti na predchádzajúce práce o korelácii kryštálovej štruktúry a magnetických vlastností zlúčenín Cu(II) (S = 1/2) obsahujúcich N-donorové chelátové ligandy a kyanidokomplexné anióny

[2,3] sa zo sústav Cu^{2+} -*baped*- $[\text{M}(\text{CN})_4]^{2-}$ (*baped* = N,N'-bis(3-aminopropyl)-1,2-diaminoetán, M = Ni, Pd) izolovali dve nové zlúčeniny $[\text{Cu}(\text{baped})][\text{M}(\text{CN})_4]\cdot\text{H}_2\text{O}$ pre M = Ni (**1**) a Pd (**2**). Kryštalová štruktúra **1** pozostáva z dvoch kryštalograficky nezávislých reťazcov typu $[\text{Cu}(\text{baped})\text{-NC-Ni}(\text{CN})_2\text{-CN}]_n$. Atómy Cu(II) vykazujú koordináciu v tvare predĺženého oktaédra, pričom v ekvatoriálnej rovine sa nachádzajú štyri atómy dusíka liganda *baped* (Cu-N_{ekv} sú v rozmedzí od 2,013(3) do 2,055(2) Å), kým axiálne polohy sú obsadené atómami dusíka z mostíkových kyanido ligandov (Cu-N_{ax} sú 2,496(2) 2,591(3) Å). Experimentálne ESR spektrá potvrdili prítomnosť predpokladanej Jahn-Tellerovej anizotropie atómu medi Cu(II). Teplotne závislú (1,8–300 K) magnetickú susceptibilitu oboch zlúčenín **1** a **2** je možné popísať Curie-Weissovým zákonom, pričom získané hodnoty $\theta = -0,51$ (**1**) a $-0,34$ K (**2**) naznačujú prítomnosť slabej antiferomagnetickej interakcie v oboch zlúčeninách.

Za finančnú podporu ďakujeme projektom VEGA-1/0089/09, APVV-VVCE-0058-07, VVGS PF 22/2011/CH ako aj MAT2008-04350, CONSOLIDER 25200 a Diputación General de Aragón (Španielsko).

- [1] A. Orendáčová, M. Kajňáková, J. Černák, J.H. Park, E. Čižmár, M. Orendáč, A. Vlček, O.V.Kravchyna, A.G. Anders, A. Feher, M.W. Meisel, Chem. Phys., 309 (2005) 115-125.
 [2] J. Černák, J. Kuchár, M. Stolárová, M. Kajňáková, M. Vavra, I. Potočník, L.R. Falvello, M. Tomás, Trans. Met. Chem., 35 (2010) 737-744.
 [3] E. Čižmár, A. Orendáčová, M. Orendáč, J. Kuchár, M. Vavra, I. Potočník, J. Černák, E. Casini, A. Feher, Sol. State Phys., 243 (2006) 268-271.

2Po45 NANODRÁTY OXIDU CINIČITÉHO PŘIPRAVENÉ METODOU VLS

Filip Šaněk¹, Zdeněk Sofer¹, David Sedmidubský¹, Štěpán Huber¹, Martin Mikulics²

¹Ústav anorganické chemie, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká Republika
zdenek.sofer@vscht.cz

²Institute of Bio- and Nanosystems, Forschungszentrum Jülich, D-52425 Jülich, Německo

Oxid ciničitý patrí medzi polovodiče nachádzajúci uplatnenie zejména v podobe chemických senzorů a vodivých průhledných kontaktů pro solární články a elektroluminiscenční diody. Vrstvy SnO₂ se obvykle připravují metodami CVD a PVD. Nanodrát je možné připravovat metodou VLS (Vapour Liquid Solid). Růst nanodrátů probíhá

z kapalných nanočástic. Prekurzory přicházející v plynné fázi do reaktoru se rozpouští v nanočástici a vytvářejí roztok. Po dosažení přesycení dochází k vylučování pevné látky v podobě monokrystalického nanodrátu. Tato metoda růstu se v současnosti aplikuje na přípravu širokého spektra materiálů, zejména A^{III}B^V a A^{II}B^{VI} polovodičů.

Nanodrát oxidu ciničitého byly připravovány v horizontálním křemenném reaktoru vybaveném magnetickým manipulátorem a odporovým topením. Magnetický manipulátor je uzpůsoben pro držení substrátu a cínového prekurzoru (SnO). SnO se za vyšších teplot rozkládá na SnO₂ a Sn, který slouží jako zdroj cínu pro růst nanodrátů. Nosným plynem byl vysoce čistý dusík. Kyslík a dusík byl do reaktoru dávkován hmotovým průtokoměrem. Pro růst nanodrátů byly použity Si substráty orientace (111) pokryté vrstvou zlata o tloušťce 2 – 8 nm. Po ohřátí substrátu v reaktoru došlo k roztavení zlaté vrstvy za vzniku nanočástic, ze kterých probíhal růst SnO₂ nanodrátů. Byl studován zejména vliv velikosti zlatých nanočástic a parciální tlak kyslíku na morfologii nanodrátů.

Tato práce vznikla za podpory GAČR (projekt č. 104/09/0621) a Ministerstva Školství ČR (projekt č. MSM6046137302).

2Po46 SYNTÉZA, CHARAKTERIZACE A STUDIUM MAGNETO-STRUKTURNÍCH KORELACÍ TROJJADERNÝCH KYANIDOKOMPLEXŮ A THIOKYANIDOKOMPLEXŮ VYBRANÝCH PŘECHODNÝCH KOVŮ

Tomáš Šilha¹, Ivan Nemeč², Radovan Herchel¹,
Zdeněk Šindelář¹, Zdeněk Trávníček²

¹Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, Tř. 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc

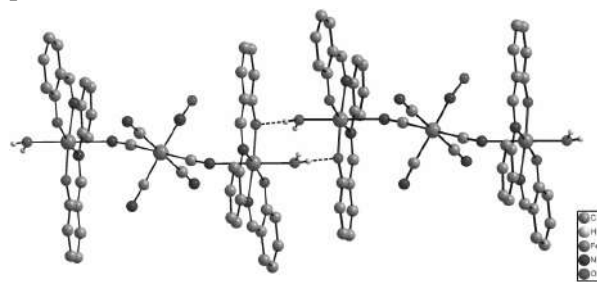
²Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů & Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzita Palackého, Tř. 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc;
zdenek.travnicek@upol.cz

Komplexy s polydentátními Schiffovými bázemi jakožto ligandy mohou sloužit k cílené přípravě vícejaderných nebo polymerních komplexních sloučenin, které mohou vykazovat vlastnosti molekulových magnetů [1-2]. Díky těmto specifickým magnetickým vlastnostem mohou připravené komplexy, potenciálně, nalézt

uplatnění např. jako materiály v elektronických nebo magnetických aplikacích [3].

Tato práce prezentuje přípravu a charakterizaci trinukleárních komplexů složení: $[(L^1)(L^4)M\{\mu_2\text{-Pt}(\text{SCN})_4\}M(L^4)(L^1)]$ nebo $[(L^1)(L^4)M\{\mu_2\text{-Fe}(\text{CN})_5(\text{NO})\}M(L^4)(L^1)]$, kde $M = \text{Fe}(\text{III})$ nebo $\text{Mn}(\text{III})$, $L^1 = \text{H}_2\text{O}$ nebo CH_3OH a L^4 je tetradentátní Schiffova báze. Struktura komplexů se skládá z magneticky aktivních částí $[M(L^4)(L^1)]^+$ a diamagnetického můstkujícího aniontu $[\text{Fe}(\text{CN})_5(\text{NO})]^{2-}$ nebo $[\text{Pt}(\text{SCN})_4]^{2-}$, vzájemně propojených do lineárního trojjaderného seskupení (Obr. 1), které přes vodíkové vazby tvoří jednorozměrné řetězce. Připravené komplexy byly charakterizovány CHN analýzou, monokrystalovou rentgenovou strukturální analýzou (7 nových struktur trojjaderných komplexů) a TG/DTA analýzou, magnetochemickými měřeními SQUID, FTIR spektroskopii a EI hmotnostní spektrometrií.

Z magnetochemických měření bylo zjištěno, že připravené komplexy vykazují přítomnost slabé antiferomagnetické výměnné interakce. Tato interakce je realizována „kovalentní“ cestou v rámci trimeru přes diamagnetické můstkující skupiny $\{\mu_2\text{-Fe}(\text{CN})_5(\text{NO})\}$ nebo $\{\mu_2\text{-Pt}(\text{SCN})_4\}$, a také v rámci jednorozměrných řetězců přes vodíkové vazby mezi magneticky aktivními částmi $[M(L^4)(L^1)]^+$. Tyto magnetické a strukturální vlastnosti komplexů budou diskutovány v rámci prezentace.



Obr. 1 Struktura komplexu $[(L^1)(L^4)\text{Fe}\{\mu_2\text{-Fe}(\text{CN})_5(\text{NO})\}\text{Fe}(L^4)(L^1)]$. Nevazebná interakce je vyznačená čárkovaně.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR MSM6198959218, vnitřní grantové agentury Univerzity Palackého (PřF_2011_014) a OPVK projektů MŠMT ČR (CZ.1.05/2.1.00/03.0058 a CZ.1.07/2.3.00/20.0017)

[1] Miyasaka H., Nezu T., Sugimoto K., Sugiura K., Yamashita M., Clérac R.: *Inorg. Chem.* **43**, 5486, (2004).

[2] Yoon J. H., Lim J. H., Kim H. C., Hong C. S.: *Inorg. Chem.* **45**, 9613, (2006).

[3] Suh M. P., Cheon Y. E., Lee E. Y.: *Coord. Chem. Rev.* **252**, 1007 (2008).

2Po47

STUDIUM POVRCHU POLYMERNÍHO SUBSTRÁTU

Simona Trostová¹, Zdeňka Kolská², Petr Slepíčka¹, Václav Švorčík¹

¹Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, Praha 6, 166 28, trostovs@vscht.cz

²Katedra chemie, Univerzita J.E. Purkyně, Ústí nad Labem

V současné době jsou polymerní materiály velmi dobře známy pro svou širokou dostupnost a uplatňují se v mnoha oborech lidské činnosti (elektronika, potravinářský průmysl, medicína, apod.). Avšak na povrchové vlastnosti materiálu jsou kladeny velké nároky a polymery těmto speciálním požadavkům často nevyhovují. Je tedy nutné jejich povrch modifikovat tak, aby disponoval žádanými vlastnostmi pro danou aplikaci.

Práce se zabývá charakterizací povrchu polymerního substrátu PMP (poly-4-methyl-1-penten). Je studován vliv modifikace Ar plazmatem na polaritu polymeru, morfologii povrchu, velikost tloušťky ablatované vrstvy, chemické složení povrchu a hodnotu zeta potenciálu. Polarita povrchu byla studována goniometricky sledováním kontaktního úhlu, velikost tloušťky ablatované vrstvy byla stanovena gravimetricky, morfologie povrchu byla studována metodou AFM. Metoda RBS byla využita ke stanovení hloubkového profilu kyslíku.

Modifikace plazmatem způsobuje nárůst polaritu povrchu, která je způsobena vytvářením především kyslíkatých funkčních skupin na povrchu materiálu [1], s rostoucí dobou stárnutí se polarita snižuje v důsledku reorientace polárních funkčních skupin směrem do objemu materiálu [2]. S rostoucím výkonem a dobou modifikace se zvětšuje tloušťka ablatované vrstvy. Největší pokles zeta potenciálu způsobuje modifikace plazmatem po dobu 15 s, s rostoucím výkonem a dobou modifikace jeho hodnota roste.

Autoři děkují za finanční podporu grantům GA CR 106/09/0125 a AS CR KAN400480701.

[1] J. Lai, B. Sunderland, J. Xue, S. Yan, W. Zhao, M. Folkard, B. D. Michael, Y. Wang, *Appl. Surf. Sci.* **252** (2006) 3375.

[2] R. Morent, N. De Geyter, C. Leys, L. Gengembre,

E. Payen, Surf. Coat. Tech. 201 (2007) 7847.

2Po48

TENKÉ VRSTVY SYSTÉMU GE-GA-S

S. Valková¹, T. Wágner¹, M. Bartoš¹, M. Pavlišta², J. Příkryl¹, M. Vlček³, L. Beneš³, B. Frumarová³, M. Frumar¹

¹Univerzita Pardubice; Fakulta chemicko-technologická, Katedra obecné a anorganické chemie, Studentská 95, Pardubice, 53210, Česká Republika

²Univerzita Pardubice; Fakulta chemicko-technologická, Ústav aplikované fyziky a matematiky, Studentská 95, Pardubice, 53210, Česká Republika

³Společná laboratoř chemie pevných látek a Ústavu makromolekulární chemie Akademie věd České republiky a Univerzity Pardubice; Studenská 84, Pardubice, 53210, Česká Republika

Kontakt: silviedivalko@centrum.cz

Amorfní chalkogenidy vzbuzují v současné době značnou pozornost mnoha výzkumných pracovišť pro své široké využití v oblasti elektroniky, optiky, analytiky a dalších odvětví průmyslu a ochrany životního prostředí. Specifické vlastnosti tenkých vrstev amorfních chalkogenidů vedou novým možnostem jejich nových aplikací v nano-optice i nano-elektronice.

V rámci výzkumu nových chalkogenidových materiálů byly přímou syntézou z prvků připraveny objemové vzorky skel o složení $\text{Ge}_{28}\text{S}_{72}$, $\text{Ge}_{26}\text{Ga}_2\text{S}_{72}$, $\text{Ge}_{24}\text{Ga}_4\text{S}_{72}$ a $\text{Ge}_{22}\text{Ga}_6\text{S}_{72}$. Z objemových vzorků všech složení byly termickým vakuovým napařováním s dvěma různými lodičkami připraveny 2 řady tenkých vrstev o tloušťkách 500 - 800 nm. Z objemových vzorků o složení $\text{Ge}_{28}\text{S}_{72}$ a $\text{Ge}_{22}\text{Ga}_6\text{S}_{72}$ byly pulzní laserovou depozicí (PLD) připraveny vrstvy o tloušťkách 400 - 600 nm.

Tenké vrstvy připravené termickým vakuovým napařováním byly charakterizovány Ramanovou spektroskopií (RS), EDX spektroskopií, UV/VIS spektrometrií, Elipsometrií (VASE) a Rentgenovou difrakční analýzou (XRD). Výsledky ukazují, že složení tenkých vrstev je v dobré shodě s teoretickými výpočty pro většinu vzorků. Index lomu se pohyboval v rozmezí 2,1-2,5 pro vlnové délky 300-2300nm. S výjimkou vrstev o složení $\text{Ge}_{28}\text{S}_{72}$ však byly všechny vzorky opticky nehomogenní, index lomu byl gradovaný.

Vrstvy připravené metodou PLD byly charakterizovány EDX spektroskopií, UV/VIS spektrometrií, Elipsometrií (VASE) a Rentgenovou difrakční analýzou (XRD). Tenké vrstvy byly opticky homogenní, bez gradace

indexu lomu a v dobré shodě s teoreticky vypočítaným složením.

U těchto vzorků byly studovány tepelně indukované změny struktury v případě vrstev připravených termickým vakuovým napařováním a fotoindukovaná difuze stříbra v případě vzorků připravených pulzní laserovou depozicí a navrženy jejich potenciální aplikace.

Autoři děkují Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy České Republiky MSM0021627501, Výzkumnému Centru LC523 Univerzity Pardubice a grantům GACR P204/11/0832 a P106/11/0506 za jejich finanční podporu.

2Po49 ELEKTROKINETICKÝ POTENCIÁL RUTILOVÝCH PIGMENTŮ TYPU Ti_1 .



Jan Večeřa¹, Jan Čech¹, Petr Mikulášek², Petra Šulcová¹

¹Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Doubravice 41, 532 10 Pardubice, ČR, jan.vecera@student.upce.cz

²Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, ČR, petr.mikulasek@upce.cz

Elektrokinetický (zeta) potenciál patří mezi povrchové vlastnosti pigmentů a je definovaný jako rozdíl potenciálů na fázovém rozhraní, které se ustavuje při pohybu pevné částice s elektrickou dvojvrstvou v roztoku. Závisí na teplotě, pH prostředí, koncentraci disperze, velikosti částic, použitém přístroji, atd. Je ukazatelem stability pigmentových disperzí, které jsou tím stabilnější, čím vzdálenější je elektrokinetický potenciál od nuly (tzv. isoelektrický bod, bod maximální nestability). Hranicí stability je hodnota ± 30 mV [1].

Vybrané pigmenty (připravené syntézou v tuhé fázi (M = Sb, W) při teplotě výpalu 1050 °C pro $x = 0; 0,05; 0,1; 0,2; 0,3; 0,5$ a o složení $x = 0,2$ pro teplotu výpalu 850, 950, 1050, 1150 °C) mají záporný elektrokinetický potenciál v intervalu od -43,8 do -18,5 mV, přičemž nižší hodnoty poskytují pigmenty obsahující antimon. Nejmenší střední velikost částic způsobuje nejnižší hodnoty elektrokinetického potenciálu (například pro pigment $\text{Ti}_{0,4}\text{Cr}_{0,2}\text{Sb}_{0,4}\text{O}_2$ připravený při teplotě 1050 °C je střední velikost částic $d_{50} = 1,12$ μm a elektrokinetický potenciál $\zeta = -43,81$ mV). Pro oba nábojově kompenzující prvky s rostoucím složením x i teplotou výpalu elektrokinetický

potenciál nejprve klesá a poté roste (minima má pro $x = 0,2$ a teplotu výpalu $1050\text{ }^{\circ}\text{C}$).

Výzkum anorganických pigmentů je na pracovišti autorů podporován IGA Univerzity Pardubice (SGFChT04).

[1] Jiří Palarčík: *Studium zeta potenciálu titanové běloby*. Disertační práce, Univerzita Pardubice, 2009.

2Po50

KOMPOZITNÍ MEMBRÁNA (POLYIMID - SILIKALIT-1): IDENTIFIKACE MIKROSTRUKTURY, VÝPOČET EFEKTIVNÍ DIFUZIVITY A PERMEABILITY

Martin Veselý¹, Pavel Čapek¹, Vladimír Hejtmánek²

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

²Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i., Rozvojová 135, 165 02 Praha 6

Kompozitní membrány mohou dosahovat větší permeability při stejné nebo dokonce větší selektivitě než samotné polymerní membrány [1]. Obvykle jsou kompozitní membrány připravovány rozptýlením molekulového síta v polymerní matici. Polymerní matrice studované kompozitní membrány byla syntetizována z monomerů 4,4'-(hexafluoroisopropyliden) diftalanhidrid (6FDA) a 4,4'-oxydianilin (ODA). Do matrice byly vneseny částice silikalitu-1 s charakteristickou velikostí částic $20\text{ }\mu\text{m}$. Pro účely práce byly nejdříve pomocí řádkovacího elektronového mikroskopu získány snímky nábrusů membrány. Vzorke ke snímkování byly připraveny zaléváním membrán epoxidovou pryskyřicí. Filtrací v prostorové doméně a segmentací pořízených snímků nábrusů byly získány fázové funkce zachycující rozložení polyimidu a silikalitu-1 v plošných řezech kompozitní membránou. Následným statistickým zpracováním byly získány mikrostrukturní deskriptory, které sloužily jako vstupní informace pro stochastickou rekonstrukci membrány. Rekonstrukce využívala metody simulovaného ochlazování (žíhání). Výsledné třírozměrné repliky byly deskriptory teorie lokální pórovitosti. Dále byly spočteny jejich efektivní difuzivity a permeability. Vypočtené transportní vlastnosti byly srovnány s naměřenými daty.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č.21/2011) a Grantové agentury ČR 203/09/1353.

[1] N.N.Li, A.G.Fane, W.S.W.Ho, T.Matsuura, *Advanced Membrane Technology and Applications*, John Wiley & Sons (2008), ISBN:978-0-471-73167-2

2Po51 INTERKALACE TIMOPRAZOLU DO STRUKTURY PODVOJNÝCH VRSTEVNATÝCH HYDROXIDŮ

Zorica Zapivovarski Votipka*, František Kovanda

Ústav chemie pevných látek, Fakulta chemické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika; Zorica.Zapivovarski.Votipka@vscht.cz

Podvojně vrstevnaté hydroxidy (layered double hydroxides, LDHs) známé jako sloučeniny typu hydrotalcitu nebo aniontové jíly tvoří důležitou skupinu vrstevnatých materiálů s širokým spektrem využití. Jejich chemické složení lze vyjádřit obecným vzorcem $[\text{M}^{\text{II}}_{1-x}\text{M}^{\text{III}}_x(\text{OH})_2]^{x+}[\text{A}^{n-}_{x/n} \cdot y \text{H}_2\text{O}]^x$, kde M^{II} a M^{III} značí dvojmocný a trojmocný kovový kation a A^{n-} n-mocný anion. Vazba mezi hydroxidovými vrstvami a anionty v mezivrstvi je poměrně slabá a za vhodných podmínek může docházet k jejich výměně. Podvojně vrstevnaté hydroxidy tak mohou sloužit jako hostitelské struktury pro interkalaci rozmanitých látek včetně léčiv a biologicky významných molekul. [1]

Timoprazol(2-[(2-Pyridylmethyl)sulfinyl]-1H-benzimidazole) patří do skupiny léčiv inhibitorů protonové pumpy. Používá se k léčbě příznaků reflexní choroby jícnu a dalších problémů způsobených přebytkem žaludeční šťávy. Timoprazol je slabě rozpustný ve vodě a po rozpouštění netvoří anionty.

Byl připraven prekurzor Mg-Al hydrotalcitu v dusičnanové formě koprecipitační reakcí pod ochrannou dusíkovou atmosférou s molárním poměrem Mg/Al = 2. Aniontová výměna byla prováděna ve vodném roztoku timoprazolu, hodnota **pH byla upravena** na 9. Dále byla provedena rehydratační reakce timoprazolu ve vodném roztoku za použití prekurzoru kalcinovaného při $500\text{ }^{\circ}\text{C}$. Také byla testována rehydratace v roztoku voda/etanol. Produkty byly charakterizovány pomocí práškové rentgenové difrakce a infračervené spektroskopie.

Byla potvrzena částečná přítomnost timoprazolu ve struktuře podvojných vrstevnatých hydroxidů.

Práce byla podpořena výzkumným projektem GA ČR (P207/10/1447) a účelovou podporou na specifický vysokoškolský výzkum MŠMT (č. 21/2011)

[1] Del Hoyo C., Layered double hydroxides and human health: An overview. *Appl. Clay Sci.* 36 (2007) 103-121

2Po52 UHLÍKATÉ AEROGELY A JEJICH APLIKACE

Tomáš Zelenka¹, Václav Slovák¹

¹Ostravská univerzita v Ostravě, Přírodovědecká fakulta, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava, tomas1.zelenka@seznam.cz

Uhlíkaté aerogely mohou být získány karbonizací organických aerogelů, které jsou připravovány sol-gel polykondenzací organických monomerů, nejčastěji resorcinolu a formaldehydu [1, 2]. Jedná se o unikátní skupinu uměle připravených nanostrukturálních uhlíkatých materiálů, jejichž strukturu lze cíleně kontrolovat a připravit tak materiály o přesně definovaných povrchových, vodivostních a tepelných vlastnostech, či o dané hustotě nebo tvaru [1, 2, 3]. Vzhledem k jejich značnému měrnému povrchu (po aktivaci až ~ 2500 m² g⁻¹), vysoké porositě a nízké hustotě, jsou vhodné např. k adsorpci těžkých kovů z roztoku a nacházejí tak uplatnění při řešení environmentálních problémů [2, 3]. Výše zmíněné vlastnosti předestírají také použití ve formě nosičů katalyzátorů, přičemž kovový

katalyzátor může být deponován v uhlíkatém aerogelu o různých tvarech (kuličky, válečky, monolit) [1, 2]. U stříbrem impregnovaných uhlíkatých aerogelů bylo zjištěno, že se vyznačují silnými antibakteriálními účinky vůči *Escherichia coli* a *Staphylococcus aureus* [3]. Uhlíkaté aerogely nejsou zajímavé pouze svým vysokým povrchem, ale také tím, že mohou být elektricky vodivé. Kombinace těchto vlastností dělá tyto materiály hodnotnými pro aplikaci v elektrodách s velkým povrchem, v superkondenzátorech, palivových článcích či demineralizačních systémech. Dále je lze aplikovat jako filtrační média či náplně chromatografických kolon, ale také jako tepelné a zvukové izolanty [1, 2].

Tato práce vznikla v rámci projektu Institut environmentálních technologií, reg. č. CZ.1.05/2.1.00/03.0100 podporovaného Operačním programem Výzkum a vývoj pro Inovace, financovaného ze strukturálních fondů EU a ze státního rozpočtu ČR.

- [1] HÜSING, N.; SCHUBERT, U. Aerogels-Airy Materials: Chemistry, Structure, and Properties. **Angewandte Chemie International Edition**. 1998, 37, 1-2, s. 22-45.
- [2] **AEROGEL.ORG** [online]. 1998 [cit. 2010-10-19]. Dostupné z WWW: <<http://www.aerogel.org/>>.
- [3] ZHANG, S., et al. Preparation and characterization of antibacterial silver-dispersed activated carbon aerogels. **Carbon**. 2004, 42, 15, s. 3209-3216.

POSTERY - SEKCIA 3 ORGANICKÁ CHÉMIA A POLYMÉRY

3Po01 AKTIVITA PARAOXONÁZY A JEJ OVPLYVNENIE PODÁVANÍM FENOFIBRÁTU.

Lucia Andrežalová¹, Katarína Šišková², Jana Muchová¹, Ingrid Pauliková², Zdeňka Ďuračková¹

¹Ústav lekárskej chémie, biochémie a klinickej biochémie, Lekárska fakulta Univerzity Komenského, Sasinkova 2, 811 08 Bratislava, e-mail: lucia.andrezalova@fmed.uniba.sk

²Katedra bunkovej a molekulárnej biológie liečiv, Farmaceutická fakulta Univerzity Komenského, Kalinčiakova 8, 832 32 Bratislava

Dyslipooproteinémie, poruchy metabolizmu lipidov, sú jedným z najdôležitejších ovplyvňujúcich rizikových faktorov aterosklerózy. Úprava lipidového profilu hypolipidemikami ako sú napríklad fibráty a statíny patrí ku kľúčovým úlohám pri jej prevencii a liečbe. Významnú úlohu v antiaterogénnych procesoch majú lipoproteíny s vysokou hustotou (HDL) a s nimi asociované enzýmy, najmä paraoxonáza 1 (PON1). Cieľom práce bolo sledovať laktonázovú a arylycerázovú aktivitu PON1 a stanoviť celkovú antioxidačnú kapacitu plazmy potkanov, ktorým bola podávaná

strava bohatá na triacylglyceroly a/alebo hypolipidemikum fenofibrát. Laktonázová a arylesterázová aktivita PON1 sa stanovila spektrofotometricky voči substrátom dihydrokumarín a fenylacetát. Aktivity sú vyjadrené v U/ml plazmy. Celková antioxidačná kapacita plazmy sa stanovila metódou TEAC. V experimente sa pracovalo s potkanmi kmeňa Wistar, samce vo veku 5 – 6 týždňov. Počas 40 dní trvania experimentu im bol podávaný bravčový tuk v dávke 16g/kg/deň a fenofibrát v dávke 100mg/kg/deň. Nepozoroval sa žiadny výrazný vplyv stravy bohatej na triacylglyceroly na laktonázovú ($7,96 \pm 0,717$ u T vs. $8,89 \pm 1,037$ u K) a arylesterázovú aktivitu PON1 ($29,31 \pm 2,747$ u T vs. $32,41 \pm 4,807$ u K). Naproti tomu fenofibrát významne znížil laktonázovú ($4,73 \pm 1,055$ u KF vs. $8,89 \pm 1,037$ u K, $p < 0,05$) aj arylesterázovú aktivitu PON1 ($15,53 \pm 1,912$ u KF vs. $32,41 \pm 4,807$ u K, $p < 0,01$; $21,18 \pm 2,867$ u TF vs. $29,31 \pm 2,747$ u T, $p = 0,037$). (K = kontrolná skupina, T = skupina so stravou bohatou na triacylglyceroly, KF = kontrolná skupina s fenofibrátom, TF = skupina so stravou bohatou na triacylglyceroly s fenofibrátom). Zistilo sa, že strava bohatá na triacylglyceroly a fenofibrát nemali významný vplyv na celkovú antioxidačnú kapacitu plazmy potkanov.

Táto práca vznikla za podpory grantov VEGA grant 1/1133/11 a UK grant UK/92/2009

3Po02

PŘÍPRAVA A APLIKACE VYSOCE FLUOROVANÝCH HOVEYDOVÝCH-GRUBBSOVÝCH KATALYZÁTORŮ

Mario Babuněk¹, Vendula Kelbichová¹, Martin Schindler¹, Eva Vrbková¹, Jan Hošek¹, Markéta Rybáčková¹, Jaroslav Kvíčala¹

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

S objevem Grubbsových a Hoveydových-Grubbsových katalyzátorů se metateze alkenů stala jednou z nejrychleji se rozvíjejících se oblastí organokovové chemie. Naším cílem byla příprava různých typů polyfluoralkylovaných Hoveydových-Grubbsových katalyzátorů a jejich aplikace v homogenní katalýze.

Nejprve jsme reakcí mesitylamínu s glyoxalem získali diimin, který jsme redukcí na diamín a působením triethyl-orthoformiátu v kyselém prostředí převedli na dihydroimidazoliovou sůl. Její dehydrohalogenací KOH a záchytem vzniklého karbenu chloroformem jsme získali

reaktivní trichlormethylovaný intermediát jako stálý prekurzor NHC ligandu, který jsme využili pro syntézu katalyzátorů.

Dále jsme modifikovali spodní část Hoveydova-Grubbsova katalyzátoru zavedením perfluoralkylového řetězce na aromatické jádro isopropoxybenzylidenového ligandu. V jiné variantě modifikace jsme substituovali chloridové anionty perfluoralkanoátovými a perfluorpolyoxaalkanoátovými ligandy. Jako potenciální náhradu mesitylenových skupin NHC ligandů jsme syntetizovali aminy s terciárními polyfluoralkylovými skupinami.

Pro připravené typy katalyzátorů jsme studovali reaktivitu při zkřížených metatezích. Zatímco syntéza bis(polyfluoralkylovaných) alkenů metatezí vyžadovala použití odolnějších katalyzátorů druhé generace, aktivní perfluoralkylovaný katalyzátor první generace umožnil syntézu silylovaných alkenů bez rizika migrace dvojné vazby.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum MŠMT (Rozhodnutí č. 21/2011), grantu GAČR č. 207/10/1533 a Centra základního výzkumu LC 06070.

3Po03

SCAVENGING AND CHAIN-BREAKING ACTIVITY OF BUCILLAMINE ON FREE-RADICAL-MEDIATED DEGRADATION OF HIGH-MOLAR-MASS HYALURONAN

Mária Baňasová¹, Katarína Valachová¹, Jozef Rychlý², Elena Priesolová³, Milan Nagy³, Ivo Juránek¹, Ladislav Šoltés¹

¹Institute of Experimental Pharmacology and Toxicology, Slovak Academy of Sciences, SK-84104, Bratislava, Slovakia

²Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, SK-84541, Bratislava, Slovakia

³Faculty of Pharmacy, Comenius University, SK-83232, Bratislava, Slovakia

Hyaluronan (HA), a glycosaminoglycan, is a main component of the joint synovial fluid [1]. Under pathological conditions, free-radical-mediated degradation of high-molar-mass HA is often involved and yields HA fragments of various sizes. The present study was designed to model the HA degradation *in vitro* using Weissberger's oxidative system comprising ascorbate plus Cu(II). Generating hydroxyl radicals, the system imitates early stage of acute phase of joint inflammation. To monitor HA oxidative degradation, which is accompanied by decrease of an average molecular size, dynamic

viscosity of HA in the reaction mixture was followed by means of rotational viscometry. Time and dose-dependent changes of the HA dynamic viscosity in the absence and presence of a disease-modifying anti-rheumatic drug bucillamine were recorded. In parallel, the ABTS and DPPH assays, non-isothermal chemiluminometry (CL), and oxymetry were applied to follow the overall process.

Scavenging activity of bucillamine towards $\text{ABTS}^{\bullet+}$ cation radicals and DPPH^{\bullet} radicals (IC_{50} : 4.00 and 8.96 μM , respectively) suggested its good radical scavenging capacity. In agreement, rotational viscometry revealed that bucillamine (1, 10 and 100 μM) exerted protection against free-radical-mediated HA degradation, indicating that effective removal of $\cdot\text{OH}$ and peroxy radicals may be involved. In addition, bucillamine reduced the amount of the generated hydroperoxides in HA as determined by CL in oxygen and nitrogen atmosphere. Finally, the results of oxymetry demonstrated the ability of bucillamine to reduce the oxygen consumption during oxidative HA degradation. In conclusion, our findings suggest that bucillamine may be considered as a prospective compound in preventing and/or healing oxidative HA degradation *in vivo*.

Supported by: VEGA (2/0083/09; 2/0011/11, 2/0081/11)

[1] Valachová K., Rapta P., Kogan G., Hrabárová E., Gemeiner P., Šoltés L.: ChemBiodivers, 2009

3Po04

DEVELOPMENT OF $\text{PhSCF}_2\text{CF}_2\text{SiMe}_3$ AS TETRAFLUOROETHYLENE RADICAL ANION EQUIVALENT. PREPARATION OF TETRAFLUOROETHYL SUBSTITUTED ALCOHOLS AND TETRAFLUORO-TETRAHYDRO-PYRANS

Petr Beier¹, Yana Chernykh¹, Blanka Klepetářová¹

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

$\text{PhSCF}_2\text{CF}_2\text{SiMe}_3$ (**1**) [1] was developed as tetrafluoroethylene radical anion equivalent for the introduction of CF_2CF_2 moiety.

Fluoride-initiated nucleophilic addition of **1** to carbonyl compounds provided the corresponding

adducts **2**. Their reduction gave tetrafluoroethyl containing alcohols **3**. Allyl ethers **4** underwent radical cyclizations affording tetrafluoro-tetrahydro-pyrans **5** (Fig. 1).

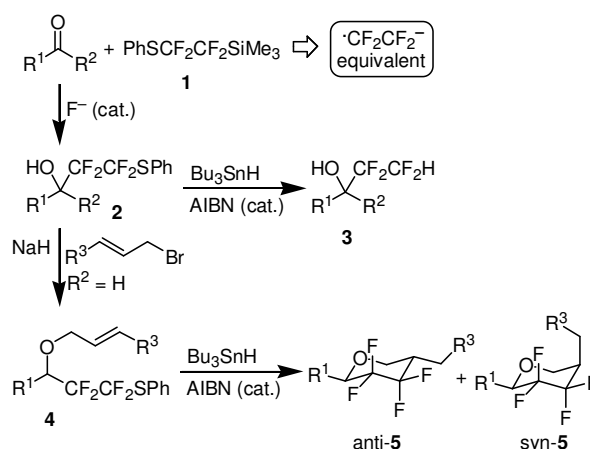


Fig. 1

Support of this work from the Academy of Science of the Czech Republic (Research Plan AVZ40550506) and Grant Agency of the Czech Republic (207/11/0421) is gratefully acknowledged.

[1] F. Toulgoat, B. R. Langlois, M. Medebielle, J.-Y. Sanchez: J. Org. Chem., (2007) 72, 9046.

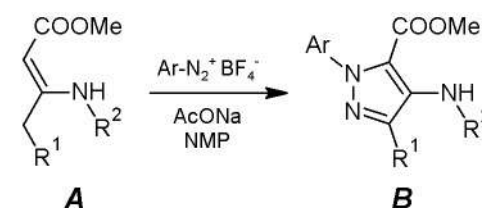
3Po05

VYUŽITÍ „PUSH-PULL“-POLARIZOVANÝCH ETHYLENŮ PRO SYNTÉZU SUBSTITUOVANÝCH 4-AMINO-1-ARYL-1H-PYRAZOL-5-KARBOXYLÁTŮ

Břetislav Brož¹, Petr Šimůnek¹

¹Ústav organické chemie a technologie, Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice 2, Česká republika, Bretislav.Broz@student.upce.cz

Jednoduchou, jednodukovou metodu byly připraveny methylestery substituovaných 4-amino-1-aryl-1H-pyrazol-5-karboxylových kyselin (Obr. 1B). Jako polarizované ethyleny byly zvoleny substituované enaminoestery (Obr. 1A). Reakce probíhala s různými benzendiazonium tetrafluoroforáty za mírných podmínek. Struktury získaných produktů byly ověřeny pomocí GC/MS a NMR spektroskopie.



Obr. 1 Príprava substituovaných 1*H*-pyrazol-5-karboxylátů; R¹ = Me, COOMe, R² = Me, *n*-Pr, Ar = (4-Me)Ph, (4-F)Ph, (4-NO₂)Ph.

Práce navazuje na nedávna studia syntéz 4-amino-1-aryl-1*H*-pyrazolů [1] a 3-acyl-4-amino-1-aryl-1*H*-pyrazolů [2] a prináša některé nové poznatky o reaktivitě a zejména o separaci a čištění produktů. Mechanismus reakce však ještě není dostatečně prozkoumán. Podmínky a postupy budou diskutovány.

Tato práce byla vytvořena za finanční podpory Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (MSM 002 162 7501).

[1] Šimůnek P., Svobodová M., Bertolasi V., Macháček V.: *Synthesis*, **2008**, *11*, 1761.

[2] Šimůnek P., Svobodová M., Macháček V.: *J. Heterocycl. Chem.*, **2009**, *46*, 650.

3Po06

ŠTÚDIUM VZÁJOMNEJ PREMENY SPIROINDOLÍN[3,5']TIAZOLÍNŮV A TIAZÍNO[6,5-B]INDOLOV

Mariana Budovská¹, Peter Kutschy¹, Martina Pilátová², Ján Mojžiš²

¹Univerzita P.J. Šafárika, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Katedra organickej chémie, Moyzesova 11, 040 01 Košice

²Univerzita P. J. Šafárika, Lekárska fakulta, Ústav farmakológie, Tr. SNP 1, 040 66 Košice

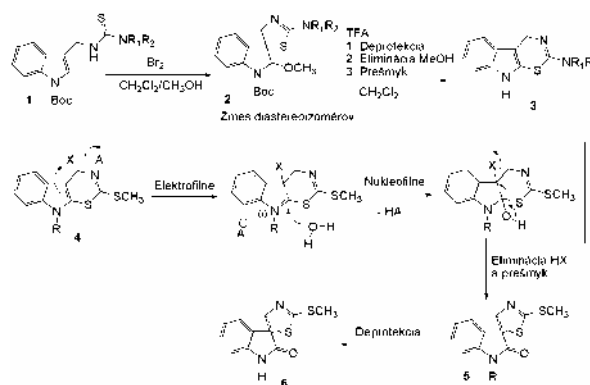
mariana.budovska@gmail.com

Zaujímavou a štruktúrne neobvyklou skupinou prírodných látok sú indolové fytoalexíny spiroindolín[3,5']tiazolínového typu, napr. (*S*)-(-)-spirobrasinín, (*R*)-(+)-1-metoxyspirobrasinín a (2*R*,3*R*)-(-)-1-metoxyspirobrasinolmetyléter, izolované z ekonomicky významných rastlín čeľade Kapustovité [1, 2]. Medzi indolové fytoalexíny patrí aj cyklobrasinín [1, 2], obsahujúci kondenzovaný tiazíno[6,5-b]indolový tricyklický systém. Tieto indolové fytoalexíny vykazujú protirakovinovú aktivitu [3].

Cieľom práce bolo vypracovať jednoduchú metodológiu umožňujúcu syntézu spiroindolín[tiazolínov a tiazínoindolov na základe ich vzájomnej transformácie. Metóda elektrofilnej-nukleofilnej difunkcionalizácie indolu bola využitá pri spirocyklizácii aminoderivátov 1-Boc-brasinínu **1** s brómom v prítomnosti metanolu za vzniku 1-Boc-2'-aminoanalógov 1-metoxyspirobrasinolmetyléru **2**, ktoré v kyslom prostredí podliehajú kaskáde reakcií zahrňujúcich deprotekcii, elimináciu

metanolu a prešmyk na 2-aminoanalógy cyklobrasinínu **3**.

V prípade chirálnych 9-acylderivátov cyklobrasinínu **4** bola študovaná metóda elektrofilnej-nukleofilnej difunkcionalizácie indolového jadra použitím halogenačného elektrofilného činidla a vody ako nukleofilu za súčasného prešmyku na 1-substituované deriváty spirobrasinínu **5**. Deprotekcia 1-acylderivátov **5** poskytla spirobrasinín (**6**). Pri premene chirálnym acylom substituovaných derivátov cyklobrasinínu **4** bola skúmaná stereoselektivita študovaných reakcií s cieľom pripraviť diastereoizomérené a enantiomérené čisté produkty. Syntetizované produkty vykazujú antiproliferačnú aktivitu voči ľudským nádorovým bunkovým líniam leukémie, rakoviny prsníka, krčka maternice a pľúc.



Obr. 1

Táto práca vznikla s podporou VEGA grantu č. 1/0406/10.

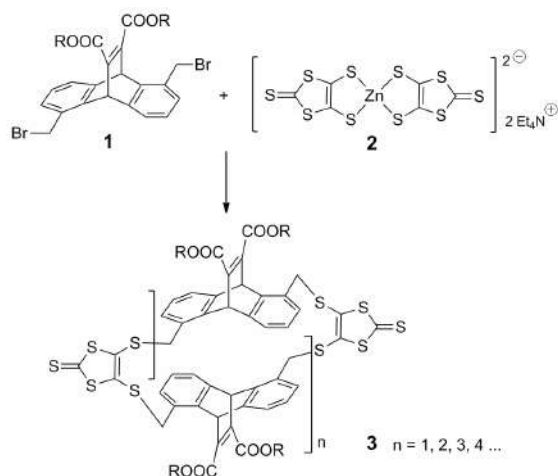
- [1] Pedras M. S. C., Zheng Q., Sarma-Mamillapale V. H.: *Nat. Prod. Commun.* **2007**, *2*, 319.
- [2] Kutschy P., Mezencev R.: *Indole Phytoalexins from Brassicaceae: Synthesis and Anticancer Activity*. In: *Targets in Heterocyclic Systems – Chemistry and Properties*. Attanasi O. A., Spinelli D., Eds., Italian Society of Chemistry, Urbino, Italy, 2009. Volume 12, **2008**, 120.
- [3] Mezencev R., Mojžiš J., Pilátová M., Kutschy P., Čurillová Z.: *Int. J. Canc. Prev.* **2004**, *1*, 105.

3Po07

**THIAMAKROCYKLY S CHIRÁLNÍMI
KARBOXYLÁTOVÝMI STAVEBNÍMI
BLOKY**Michal Buchta¹, Petr Holý¹, Jiří Rybáček¹¹Ústav organické chemie a biochemie, Akademie věd České republiky, v. v. i., Flemingovo náměstí 2, 166 10 Praha 6, Česká republika, buchta@uochb.cas.cz

V rámci programu přípravy ligandů pro komplexaci fullerenu jsme studovali tvorbu thiamakrocyklů z 4,5-bis(sulfanyl)-1,3-dithiol-2-thionu jako sírného spojkového prvku a bis(brommethyl)aromátů jako aromatických stavebních bloků [1]. Získané poznatky jsme se nyní využili při syntéze makrocyklických ligandů nesoucích karboxylové skupiny, které by měly zajistit lepší rozpustnost ligandů i případných fullerenných komplexů ve vodě.

Zavedení karboxylových funkcí do aromatického stavebního bloku lze provést například reakcí 1,5-bis(brommethyl)antracenu s estery acetylendikarboxylové kyseliny. S výhodou lze volit adici di((-)-menthyl)esteru [2], při které vzniká směs diastereoisomerních produktů, která je dobře dělitelná, a tak lze získat pro syntézu makrocyklů homochirální bisbrommethylový stavební blok **1**. Jeho reakcí s komplexní thiolátovou solí **2** vzniká směs makrocyklů **3** s různým počtem stavebních jednotek a oligomerních produktů (obr. 1), z níž lze jednotlivé makrocykly chromatograficky separovat. Už [3+3]thiamakrocyklus složený ze 3 sírných jednotek a 3 diesterových chirálních bloků (pro n=2) je schopen vytvořit kavitu vhodné velikosti pro inkuzi „menších“ fullerenu, např. C₆₀ a C₇₀.



Obr. 1

Práce byla provedena v rámci výzkumného záměru ZA 055 0506 a za finanční podpory Grantové agentury Akademie věd ČR (grant IAA400550704).

[1] Petr Holý, Michal Buchta, Jiří Rybáček, Jana Hodačová, Ivana Císařová: *Synthesis*, 4169-4776 (2010).

[2] James C. Adrian, Jr., Tina M. Ovitt: *Tetrahedron: Asymmetry*, 7, 2407-2410 (1996).

3Po08

**NMR STRUCTURAL STUDY OF INSTANT
COFFEE ARABINOGALACTAN-PROTEIN
OLIGOSACCHARIDES**M. Matulová¹, P. Capek¹, J. Turjan¹, J. Kozák¹, S. Kaneko², L. Navarini³, F. Suggi-Liverani³¹Institute of Chemistry, Center for Glycomics, Slovak Academy of Sciences, Dubrávská cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovakia, chemcape@savba.sk²Food Biotechnology Division, National Food Research Institute, Kannondai, Tsukuba, Ibaraki, Japan³illycaffè S.p.A., Research & Innovation, Via Flavia 110, Trieste, Italy

Coffee beans are used for many centuries for preparation of coffee brews. Due to their stimulating effect and delicious flavour, coffee belongs nowadays to the most widely used beverage and it becomes an integral part of our food chain. It has been found that polysaccharides (cellulose, (galacto)mannan and arabinogalactan-protein) represent about 50% of dry weight of beans and thus become important components affecting coffee brew functional properties. Arabinogalactan-proteins (AGPs) isolated from green coffee beans are well characterized while little attention has been dedicated to the structure of instant coffee powder arabinogalactan-protein (AGP). The pioneering work on AGP isolation procedure from instant coffee powder performed by Wolfrom and Anderson [1] has been re-discussed in our previous works [2-3].

Present study reports on *C. arabica* AGP isolated from commercial instant coffee powder, its depolymerization by means of acidic and enzymatic hydrolyses, their separation into homogeneous fractions by gel filtration chromatography and detailed structural characterization of polymer and released oligosaccharides by chemical and spectroscopic methods. Deepened NMR structural study of AGP-derived oligomers brought more light

about the fine structural features of arabinogalactan-protein found in commercial instant coffee.

Research has been supported by IllyCaffe, VEGA No. 2/0017/11 and 2/0116/10, Slovak state program for infrastructure 2003SP200280203 and Research & Development Operational Program funded by the ERDF for Centre of excellence for white-green biotechnology, ITMS: 26220120054.

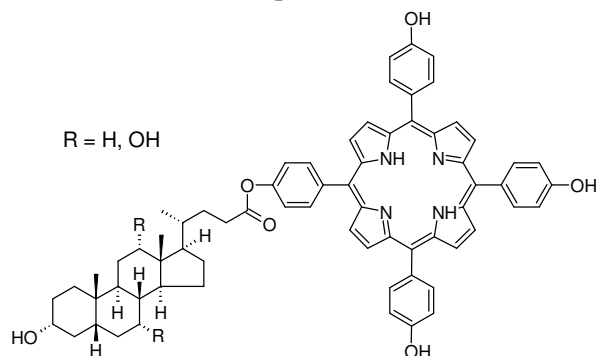
- [1] Wolfrom, L. Anderson, E., *J. Agr. Food Chem.*, 1967, 15, 687-689.
 [2] Capek, P., Matulová, M., Navarini, L., Suggi-Liverani F., *J. Food and Nutr. Res.*, 2009, 48, 80-86.
 [3] Capek, P., Matulová, M., Navarini, L., Suggi-Liverani F., *Carb. Polym.*, 2010, 80, 180-185.

3Po09 SYNTÉZA ESTERŮ PORPHYRINU SE ŽLUČOVÝMI KYSELINAMI

Lenka Cardová¹, Pavel Drašar¹

¹VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, Cardova.lenka@gmail.com

Prezentované molekuly byly připraveny použitím dvou stavebních bloků. Prvním z nich je žlučová kyselina, která slouží nejen jako chirální šablona v asymetrické syntéze, ale poslední dobou steroidní složky získávají na významu i v oblasti farmacie, supramolekulární chemie či nanotechnologií [1]. Tato část byla esterifikována na alifatickém řetězci s 4,4',4'',4'''-porfyrin-5,10,15,20-tetrayltetrafenolem. Tato aromatická složka propůjčuje látce fluorescenční aktivitu, ale zároveň je očekávána i aktivita biologická. Porfyriny jsou totiž již nějakou dobu studovány mimo jiné pro využití ve fotodynamické terapii [2], či molekulární rozpoznávání [3].



Molekuly byly připraveny reakcí žlučové kyseliny v poloze C24 s 4,4',4'',4'''-porfyrin-5,10,15,20-tetrayltetrafenolem v dimethylformamidu za použití N,N'-dicyclohexylcarbodiimidu a 4-dimethylaminopyridinu při laboratorní teplotě. U molekul byly studovány

agregační schopnosti pomocí UV-VIS, fluorescence i CD.

Tato práce byla podpořena MŠMT ČR (Projekty č. MSM6046137305, 2B06024 SUPRAFYT).

- [1] Virtanen E. et al.: *Eur. J. Org. Chem.*, 16, 3385 (2004).
 [2] Swamy N. et al.: *Bioorg. Med. Chem.*, 10, 3237 (2002).
 [3] Dukh M. et al.: *Org. Biomol. Chem* 1, 3458 (2003).

3Po10 SYNTÉZA FARMAKOFÓRNEHO LIGANDU URČENÉHO PRE VÝVOJ INHIBÍTORA TUMOROVEJ ANGIOGENÉZY S VEGFR-2 RECEPTOROVOU SELEKTIVITOU

Ľuboš Cehlárik, Andrej Boháč

Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, cehlarik@fns.uniba.sk

V súčasnosti je známych 21 komplexov VEGFR-2 receptora s jeho tyrozínkinázovými inhibítormi, ktoré majú rôzne inhibičné aktivity. Tieto komplexy boli opísané na základe elektrónovej štruktúrnej difrakcie (RTG). Pri navrhovaní nového inhibítora sme uplatnili taký výber farmakofórických fragmentov, ktoré obsahujú najdôležitejšie interakcie s vybraným proteínom. Na základe interakčnej analýzy známych inhibítorov s VEGFR-2 proteínom a uskutočnenej superimpozície sme odstránili prekrývajúce sa časti. Molekulovým modelovaním sme nahradili chýbajúce časti alkínovými a azidovými linkerami vhodnej dĺžky tak, aby vznikli stereoelektronicky kompatibilné ligandy určené pre *in situ* „Click chemistry“ metodiku, pričom ich kombináciou môže vzniknúť viacero potenciálnych inhibítorov.

3Po11 FOTO-AKTÍVNE NANOKOMPOZITY NA BÁZE ELASTOMÉROV PLNENÝCH UHLÍKOVÝMI NANOTRUBIČKAMI

Klaudia Czaničková¹, Markéta Ilčíková¹, Peter Kasák¹, Igor Krupa¹, Mária Omastová¹

¹Ústav polymérov, SAV, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, Klaudia.Czaničkova@savba.sk

V poslednej dobe narastá počet spotrebiteľských zariadení využívajúcich dotykové displeje. Našou hlavnou úlohou v projekte 7 RP NOMS (Nano-optický mechanický systém) [1] je pripraviť materiály, ktoré sú schopné vplyvom

žiarenia (IČ/UV žiarenie) meniť svoje rozmery s cieľom skonštruovať dotkový displej pre nevidiacich a slabozrakých. Konečným cieľom projektu je vyvinutie originálnych obrazoviek, na ktorých bude možné zobrazovať zložité grafické útvary, rovnice a obrázky vo forme reliéfov, čo uľahčí prístup k informáciám zrakovo postihnutým ľuďom. Dotková tabuľa môže byť pripojená k počítaču, i-Podu a mobilným telefónom. Ako najvhodnejšie pre splnenie cieľov sa ukazujú materiály na báze elastomérov obsahujúce rozdispergované uhlíkové mnohostenné, alebo jednostenné nanotrubičky (CNT). Tieto systémy sú schopné meniť svoje rozmery v závislosti od intenzity a frekvencie použitého svetla. Fotoaktúcia sa prenáša z uhlíkových nanotrubičiek na polymérnu maticu [2]. Príspevok predstaví prípravu a vlastnosti nanokompozitov s elastomérou maticou s nekovalentne modifikovanými CNT. Modifikátorom je nami pripravený kompatibilizátor na báze funkcionalizovaného pyrénu. V ďalšej časti uvedieme výsledky testovania fotoaktúcie pripravených nanokompozitov rôznymi metodikami.

Tento výskum je podporovaný projektom NOMS, ktorý je čiastočne financovaný Európskou komisiou v rámci zmluvy č. 228916 a projektom VEGA 2/0064/10.

[1] www.noms-project.eu

[2] Terentjev E. M., Ahir S. V., Huang Y. Y., Phys. Rev. B 73, 125422 (2006).

3Po12

REDUKCE KYPOVÝCH BARVIV, VLV TEPLoty, MÍRY ALKALITY A TENZIDŮ

Michal Černý¹, Zdeňka Blechová¹, Ladislav Burgert¹

¹ Ústav chemie a technologie makromolekulárních látek, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, michal.cerny@upce.cz

Kypová barviva vynikajú veľmi dobrými vlastnosťami, zejména dobrou stálosťou pri praní a v oděru [1]. Důvodom je nerozpustnosť pigmentu barviva uchyceného na celulózovom materiálu. Pro aplikaci barviva na substrát je nutné pigment barviva zredukovať na leukosloučeninu s veľmi dobrou afinitou. Po probarvení materiálu se následnou reoxidací vytvoří původní nerozpustný pigment barviva. Procesem určujícím vhodnost daného pigmentu barviva pro použití v řadě kypových barviv je jeho schopnost a rychlost redukce na leukosloučeninu [2, 3]. Míra redukce barviva ale také závisí na vnějších podmínkách,

např. vliv pH, teploty nebo textilních pomocných prostředků. Tyto vlivy jsou v prezetované práci sledovány. Vliv teploty na redukci byl sledován pro různé, v praxi nejpoužívanější, teploty (40, 60 a 90°C). Současně byl také sledován vliv různě silného alkalického prostředí potřebného k redukci kypového barviva (louh sodný nebo uhličitán sodný). Poslední sledovanou vlastností byl vliv pomocného textilního prostředku na samotnou redukci pigmentu barviva. U výše uvedených kypových barviv byly sledovány hodnoty leukopotenciálů potenciometricky a kinetika redukce kypového barviva optickou metodou. Struktura pigmentů barviv byla potvrzena pomocí ¹H a ¹³C NMR spekter.

[1] Hladík V. a kol. Textilní barvířství, SNTL Praha (1982), s.70, 142

[2] Kogan, J.M. Chemie barviv, SNTL Praha (1960), s. 445

[3] Peters, R.H. Textile chemistry III., Elsevier scientific publishing company (1975), s. 473 – 493

3Po13

KONJUGOVANÉ KVADRUPOLÁRNE DERIVÁTY KONDENZOVANÝCH TIAZOLOV

Alexandra Čibová, Peter Magdolen, Pavol Zahradník

Katedra organickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 84215 Bratislava, cibovaa@fns.uniba.sk

Zájem o vysoko konjugované zlúčeniny s nelineárno-optickými (NLO) vlastnosťami je motivovaný možnosťami ich využitia ako materiálov pre pamäťové a informačné médiá, molekulové prepínače a v oblasti laserovej techniky.

Disubstituovaný benzobistiazolový skelet predstavuje sľubný stavebný blok pre rozvoj nových organických materiálov s jedinečnými fotofyzikálnymi a fotochemickými vlastnosťami porovnateľnými s bežnými anorganickými NLO-chromofórmami.

Príprava cieľových zlúčenín, u ktorých predpokladáme zvýšené NLO vlastnosti je založená na kondenzáciách aldolového typu s navrhnutými elektrónodonornými substituentami. Tieto heterocyklické *push-pull* systémy predstavujú nový typ organických NLO chromofórov, kde sa navrhnuté metódy ich prípravy následne experimentálne overia. Ďalej je naplánovaná modifikácia π -konjugovaného mostíka (zmena dĺžky alebo jeho konštitúcie), prípadne kvarternizácia benzobistiazolového skeletu za účelom zlepšenia optoelektronických

vlastností zlúčenín. Okrem syntézy nových derivátov plánujeme experimentálne štúdium fluorescenčných a absorpčných charakteristík ako aj meranie nelineárno-optických vlastností (sledovanie dvojfotónovej absorpcie) v spolupráci s Medzinárodným laserovým centrom.

Táto práca vznikla za podpory Agentúry na podporu výskumu a vývoja (APVV-0259-07 a APVV-0424-10) a Grantu pre doktorandov a mladých vedeckých pracovníkov UK (UK/151/2011).

3Po14 SPECTRAL PROPERTIES OF CHALCONE CONTAINING TRIPHENYLAMINO STRUCTURAL UNIT IN SOLUTION AND IN POLYMER MATRICES.

Martin Danko¹, Anita Andics², Csaba Kósa¹, Pavol Hrdlovič¹, Daniel Végh²

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

²Department of Organic Chemistry, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava, Slovak Republic

Novel chalcones (3-phenyl-1-phenylprop-2-en-1-ones) substituted with electron donating diphenylaminophenyl substituent and with thiophenes with variable electronic effects were prepared. The spectral properties of these molecules in solvents such as chloroform, cyclohexane, acetonitrile, methanol and incorporated into polymer matrices of polystyrene, poly(methyl methacrylate) and poly(vinyl chloride) were compared with those of 3-[4-(*N,N*-dimethylamino)-phenyl]-1-phenylprop-2-en-1-one and 3-[4-(*N,N*-dimethylamino)phenyl]-1-(4-nitrophenyl)prop-2-en-1-one. The longest wavelength absorption band of all chalcones was in the range of 400 – 450 nm and did not appear to be influenced by the medium. The fluorescence of chalcones was red-shifted to the range of 530 – 575 nm and was most intense in chloroform. The fluorescence of all chalcones was effectively quenched in polar acetonitrile and methanol. In contrast, the fluorescence became more intense when the molecule was incorporated in a polymer matrix. The lifetime of fluorescence was in the range of 1 – 4 ns. The Stokes shift was in the range of 4000 - 5000 cm⁻¹ in chloroform, and lower in all other media. The spectral behavior of model chalcones and novel chalcones with diphenylamino substituents was similar, producing observable fluorescence in several polymer matrices. The effect of the solvent on the

fluorescence is discussed in terms of negative and positive solvatokinetic effects.

Acknowledgement: Authors thank grant agency APVV for support of project APVV-0109-10. This publication is the result of the project implementation: Centre for materials, layers and systems for applications and chemical processes under extreme conditions Stage II supported by the Research & Development Operational Programme funded by the ERDF.

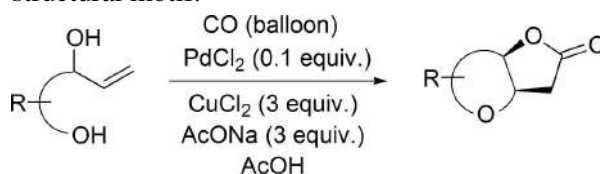
3Po15 ASYMMETRIC INTRAMOLECULAR Pd(II)-CATALYZED OXYCARBONYLATION OF UNSATURATED DIOLS

Jana Doháňošová^{1,2}, Tibor Gracza¹, Angelika Lásiková¹, Giang Vo-Thanh², Martial Toffano²

¹Department of Organic Chemistry, Slovak University of Technology in Bratislava, Slovakia.

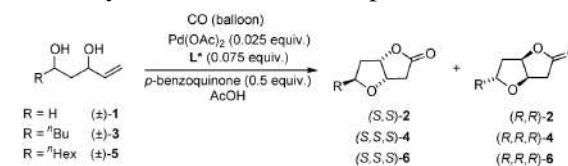
²Laboratoire de Catalyse Moléculaire, Université Paris-Sud 11, France. jana.dohanosova@stuba.sk

Intramolecular palladium(II)-catalyzed oxycarbonylation of unsaturated polyols is an important transformation of alkenes into bisheterocyclic lactones. [1] The first examples of this domino reaction, Pd(II)-promoted cyclization and intramolecular oxycarbonylation were described for 1,4- and 1,3-alkenediols providing *cis*-fused bicyclic lactones involving tetrahydropyran and/or tetrahydrofuran [2] structural motif.



R = OH, protected OH (OP), H, R

Recently, we have reported a kinetic resolution process of racemic alkene-1,3-diols (\pm)-**1**, (\pm)-**3** and (\pm)-**5** catalyzed by palladium(II) with chiral bis(oxazolines) [3]. This was the first report of an enantioselective oxycarbonylative bicyclization. Conversion of the reaction was controlled by reoxidant amount, which represents a novelty in kinetic resolution processes.



The main aim of ongoing project is further development of asymmetric intramolecular Pd(II)-catalyzed oxycarbonylation in an effort to

improve the enantioselectivity comparing with preliminary obtained results. The influence of ionic liquids will be discussed.

This work has been supported by Grant Agency for Science (VEGA No. 1/0236/09 1/0115/10 APVV, Bratislava and EU Structural Funds (ITMS 26240120001 and 26240120025).

- [1] For reviews see: (a) Muzart, J. *Tetrahedron* **2005**, *61*, 5955. (b) Muzart, J. *Tetrahedron* **2005**, *61*, 9423. (c) Gracza, T.; Hasenöhrl, T.; Stahl, U.; Jäger, V. *Synthesis* **1991**, 1108.
 [2] (a) Semmelhack, M. F.; Bodurow, Ch.; Baum, M. *Tetrahedron Lett.* **1984**, *25*, 3171. (b) Tamaru, Y.; Kobayashi, T.; Kawamura, S.-i.; Ochiai, H.; Hojo, M.; Yoshida, Z.-i. *Tetrahedron Lett.* **1985**, *26*, 3207.
 [3] Kapitán, P.; Gracza, T. *Arkivoc* **2008** (viii) 8-17.

3Po16 HETEROCYKLICKÉ ANALÓGY TAKRÍNU S VÝZNAMNOU ANTICHOLINESTERÁZOVOU AKTIVITOU

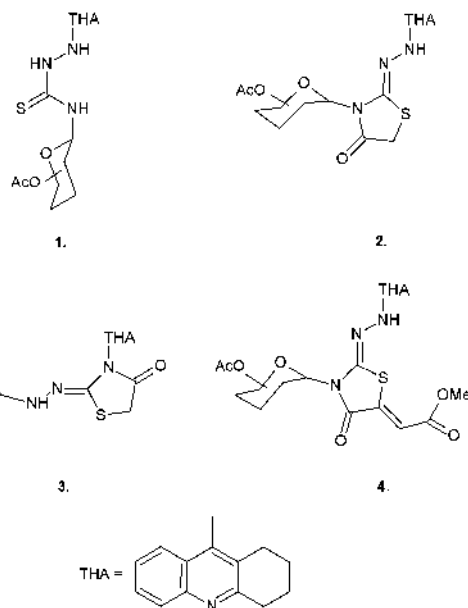
L. Drajna, J. Imrich, S. Hamuláková, P. Kristian

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

Alzheimerova choroba (AD) je neurodegeneratívne ochorenie charakterizované poklesom kognitívnych funkcií, ktorého pôvod a patogenéza sú kvôli množstvu faktorov nejasné. Dnes najúspešnejší prístup vývoja liečiv na AD sa opiera o cholinergickú hypotézu zahrňujúcu inhibíciu acetylcholinesterázy, ktorou sa zabraňuje znižovaniu koncentrácie acetylcholínu v mozgu, dôsledkom čoho je udržanie neurotransmisie v cholinergických synapsiách. Na trhu je niekoľko cholinergických liečiv ako tacrin, galanthamin, rivastigmin a donepezil, ktoré však majú len obmedzenú účinnosť.

Vo vývoji nových cholinergických liečiv hrajú dôležitú úlohu glykokonjugáty, kde glykozidická zložka je naviazaná na aglykón so zaujímavými biologickými vlastnosťami. Vzhľadom na náš záujem o deriváty takrínu, sme pripravili nové glykokonjugáty so sacharidovou časťou pripojenou na takrínový skelet cez nový tiosemikarbazidový linker a cez tiazolidínový skelet. Za sacharidové prekurzory sme zvolili glykozylizotiokyanáty,¹ ktoré sa získali konverziou peracetylovaných sacharidov s trimetylsilylizotiokyanátom za prítomnosti SnCl₄. Príslušné tiosemikarbazidy **1** sa syntetizovali reakciou

izotiokyanátov s 9-hydrazino-1,2,3,4-tetrahydroakridínom.² Adično-cyklizačná reakcia tiosemikarbazidov **1** s metylbromacetátom **2**, bromacetylbromidom **3** a dimetylacetyléndikarboxylátom **4** viedla ku vzniku nových 5-článkových glykozyltiazolidínov takrínového typu. Popisuje sa mechanizmus týchto reakcií. Novosyntetizované zlúčeniny boli testované na anticholinesterázovú aktivitu na Univerzite Obrany v Hradci Králové, kde sa zistili významné ich inhibičné vlastnosti.



Táto práca bola finančne podporená agentúrou MŠ SR VEGA (grant č. 1/0097/10), štátnym programom NMR (grant č. 2003SP200280203) a grantovým programom UPJŠ-VVGS (grant č. 7/09-10).

- [1] Al-Masoudi N. et al.: *J. Chem. Soc. Perkin Trans.1* 947-953 (1998)
 [2] Elsinghorst P.W., Tanarro C.M.G., Guetschow M.: *J. Med. Chem.* **49**, 7540-7544 (2006)

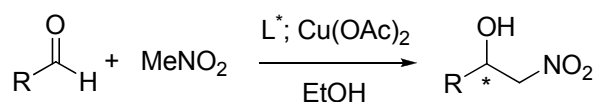
3Po17 MĚDNATÉ KOMPLEXY CHIRÁLNÍCH IMIDAZOLIN-5-ONŮ A IMIDAZOLIDIN-5- ONŮ JAKO ENANTIOSELEKTIVNÍ KATALYZÁTORY HENRYHO REAKCE

Pavel Drabina¹, Illia Panov¹, Sergej Karel¹, Miloš Sedlák¹

¹*Ústav organickej chémie a technológie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice,
Studentská 573, 532 10 Pardubice,
pavel.drabina@upce.cz*

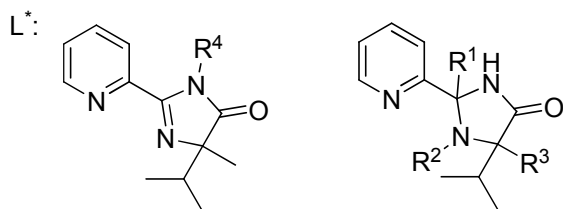
Byly připraveny substituované 2-(pyridin-2-yl)imidazolidin-5-ony v opticky čisté formě se dvěma stereogenními centry na atomech uhlíku v polohách 2 a 5. Deriváty se lišily polohou

methylskupiny na imidazolidin-5-onovém cyklu. Absolutní konfigurace jednotlivých ligandů byly stanoveny pomocí rentgenové difrakce jejich komplexů s octanem měďnatým nebo pomocí ^1H NMR 1D NOESY experimentů. *In situ* připravené měďnaté komplexy příslušných ligandů byly studovány jako enantioselektivní katalyzátory pro nitroaldolovou (*Henryho*) reakci aromatických a alifatických aldehydů s nitromethanem poskytující odpovídající substituované 2-nitroethanoly (Obr. 1). V porovnání s dříve připravenými deriváty 2-(pyridin-2-yl)imidazolin-5-onu [1] vykazovaly tyto ligandy podstatně vyšší enantioselektivitu, která je řízená geometrií měďnatého komplexu. Deriváty s *anti* uspořádáním na imidazolidin-5-onovém cyklu jsou vysoce enantioselektivní (až 96% ee), zatímco u forem se *syn* uspořádáním byla pozorována výrazně nižší enantioselektivita (25–27% ee) [2].



$\text{R}^1; \text{R}^2; \text{R}^3 = \text{H}; \text{Me}$
 $\text{R}^4 = \text{Me}; \text{Bn}$
 $\text{R} = 9 \text{ arylů}; 3 \text{ alkyly}$

až 96 % ee



Obr. 1

Práce byla podpořena projektem MŠMT ČR – MSM 0021627501.

[1] Sedlák M., Drabina P., Keder R., Hanusek J. Císařová I., Růžička A.: *J. Organomet. Chem.* **2006**, 691, 2623.

[2] Panov I., Drabina P., Paďělková Z., Šimůnek P., Sedlák M.: *J. Org. Chem.* **2011**, 76, 4787.

3Po18 STEREOYNAMICS OF ATROPISOMERS OF 2,2'-BIS(ORTHO-SUBSTITUTED PHENYL)-1,1'-BINAPHTHYLS

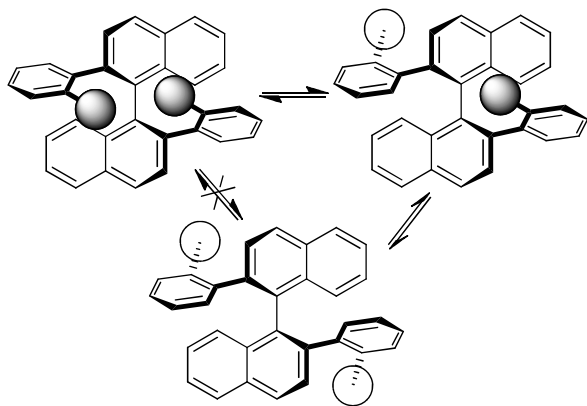
Marcel Ehn, Branislav Horváth, Martin Putala

Department of Organic Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University in Bratislava, Mlynská dolina, 845 12 Bratislava, Slovak Republic, ehne@email.cz

There are ambitions to design artificial synthetic machines imitating mechanical movement of macroscopic machines and machine parts. Molecules of B-A-B constitution are one of the most investigated systems in respect to their stereodynamics.¹

Molecular triads B-A-B where B is nonsymmetrically substituted achiral group and A is aromatic or heteroaromatic group can exist in the form of two diastereomeric conformers, *syn* and *anti* (*meso* and *racemic*), interconvertible via restricted rotation around B-A connection. Three diastereomers of such triads are observed if B unit is chiral.²

We have developed synthetic methodology for efficient introduction of aryl groups to position 2 and 2' of 1,1'-binaphthyl.³ We applied it for preparation of 2,2'-bis(*ortho*-substituted phenyl)-1,1'-binaphthyls which represent triads B-A-B. Even the B unit is achiral, three diastereoisomers are observed due to chirality of the central unit A. Study of their atropisomerization both by theoretical (DFT calculations) and experimental (VT NMR) methods will be presented. Theoretical calculations helped to distinguish NMR signals of atropisomers and to assign activation parameters to experimentally determined values. Activation parameters were found to correspond to the effective size of group attached to the *ortho*-position of phenyls (-OMe < -NMe₂ < -Me < *i*-Pr < co-condensed benzene ring).



- [1] Lipowsky R, Klumpp S., *Physica A* **2005**, 352, 53-112.
 [2] Gawronski J., Kacprzak K., *Chirality* **2002**, 14, 689-702.
 [3] Krascenicsová, K., Walla, P., Kasák, P., Uray, G., Kappe, C. O., Putala M., *Chem. Commun.*, **2004**, 2606-2607.

3Po19 OXIDAČNÍ STABILITA POLYANILINU

M. Exnerová, Z. Rozlívková, M. Trchová, J. Stejskal

*Ústav makromolekulární chemie, AV ČR, v. v. i.,
 Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6, Česká
 Republika (exnerova@imc.cas.cz)*

Polyanilin patří k nejvýznamnějším vodivým polymerům [1]. Jeho stabilita je podmínkou pro použití v nejrůznějších aplikacích, např. elektrodách palivových článků. Granulární a nanotubulární forma polyanilinu byla suspendována v alkalickém, neutrálním a kyselém vodném prostředí za přítomnosti silných oxidačních činidel – peroxidu vodíku nebo peroxydisíranu amonného po dobu 10 nebo 60 dní. Reziduální vzorky byly zkoumány pomocí UV– viditelných, FTIR a Ramanových spekter, dále byly vyhodnoceny výtěžky a stanovena jejich elektrická vodivost. Emeraldinová forma polyanilinu se oxiduje na perniglanilinovou, o které se obecně předpokládá, že je nestabilní. Váha vzorku i základní funkce molekulární struktury, s výjimkou vodivosti, však překvapivě zůstaly zachovány i po expozici v silně oxidačním prostředí.

- [1] J. Stejskal, I. Sapurina, M. Trchová, *Prog. Polym. Sci.* 35, 1420 (2010).

3Po20 OČKOVANIE POLYPROPYLÉNU METAKRYLÁTMI V TUHEJ FÁZE

Agnesa Fiedlerová, Štefan Chmela

*Ústav polymérov Slovenskej akadémie vied,
 Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, Slovensko
 E-mail: Agnesa.Fiedlerova@savba.sk*

Izotaktický polypropylén je už desaťročia jedným z priemyselne najviac využívaných polymérov. Jeho nepolárny charakter však obmedzuje jeho komerčnú aplikovateľnosť pri príprave viaczožkových polymérnych zmesí s polárnymi polymérmi. Jednou z možností zníženia hydrofóbnosti PP a umožneniu prípravy viaczožkových polymérnych zmesí je jeho modifikácia očkovaním v tuhej fáze. Cieľom tejto práce bolo nielen prešetriť možnosti očkovania PP v tuhej fáze pomocou bežne používaného metyl- (MMA) a butylmetakrylátu (BMA), ale aj pomocou 2-hydroxyetylmetakrylátu (HEMA). Vďaka prítomnosti polárnej hydroxylovej skupiny v HEMA by sa mala výraznejšie zvýšiť hydrofilnosť očkovaného PP, čo by mohlo mať za následok širšie uplatnenie takto modifikovaného PP pri príprave kompozitných materiálov. Ako iniciátor očkovacej reakcie bol použitý terc.butylperoxypivalát (TBPPI) resp. azo-bis-izobutyronitril (AIBN). Študovala sa závislosť účinnosti očkovania monomérov od koncentrácie použitého iniciátora a závislosť účinnosti očkovania od obsahu použitého monoméru v reakčnej zmesi za použitia konštantnej koncentrácie peroxidu. Očkovanie PP zmesi v tuhej fáze sa robilo v dusíkovej atmosfére za stáleho miešania v reakčnej banke po dobu 7 polčasov rozpadu použitého iniciátora. Homopolymér vzniknutý počas reakcie sa odstránil extrahovaním naočkovanej vzorky v dimetylformamide. Množstvo naočkovaného monoméru sa sledovalo meraním FTIR spektier filmov získaných vylišovaním očkovaných vzoriek.

Autori ďakujú Grantovej agentúre VEGA za finančnú podporu v rámci Projektu VEGA 2/0072/1.

3Po21 SYNTHESIS AND PHOTOPHYSICAL CHARACTERIZATION OF BINAPHTHALENE-COUMARINE DERIVATIVES

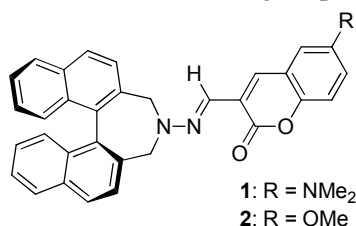
Juraj Filo¹, Marek Cigán², Martin Putala*¹

¹ Department of Organic Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University in Bratislava, Mlynská dolina CH2, 845 12 Bratislava, Slovak Republic, filo@fns.uniba.sk

² Institute of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Mlynská dolina CH-2, 845 12 Bratislava, Slovak Republic

Many natural and synthetic derivatives of coumarin (2*H*-chromen-2-one) are used in different applications in chemistry, biology, medicine and physics. The reasons for their wide range of applications are their spectral properties, mainly the intense fluorescence observed for many derivatives with appropriate substitution. These derivatives are important components of fluorescence probes, sensors and switches, a topic which has been reviewed by de Silva [1].

It was found that 2-oxo-2*H*-chromene-3-carbaldehydes readily react with hydrazides to afford corresponding hydrazones, which exhibit reversible *E-Z* isomerisation around the C=N bond [2]. We prepared, and characterized new type of coumarin dyes with chiral binaphthyl moiety attached via hydrazone linkage (**1** and **2**). Photophysical characterization of these derivatives was performed in different organic solvents. We observed that fluorescence strongly depend on the solvent polarity. The photophysical properties of these compounds in nonpolar solvents are drastically different than those in other solvents of moderate to higher polarities.



[1] Prasanna de Silva, A.; Gunaratante, H.Q.N.; Gunnlaugsson, Th.; Huxley, A.J.M.; Mc Coy, C.P.; Rademacher, J.T.; Rice, T.E. *Chem. Rev.* **1997**, 97, 1515-1566.

[2] Flašík, R.; Stankovičová, H.; Gáplovský, A.; Donovalová, J. *Molecules* **2009**, 14, 4838-4848.

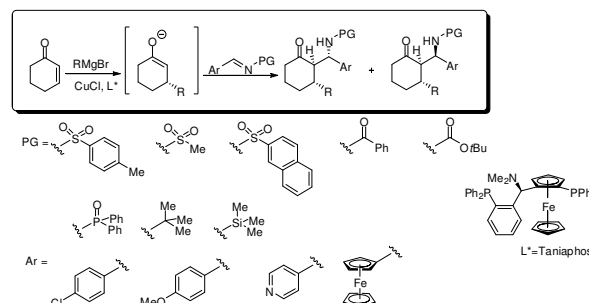
3Po22 STEREOSELEKTÍVNE TANDEMOVÉ MICHAELOVE/MANNICHOVE REAKCIE KATALYZOVANÉ KOMPLEXOM CU/TANIAPHOS

Zuzana Galeštoková¹, Radovan Šebesta¹

¹ Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Katedra organickej chémie, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, galestokova@fns.uniba.sk

Konjugovaná adícia je vhodným iniciátorom pre tandemové reakcie. Enolát vznikajúci 1,4-adíciou organokovového činidla na α,β -nenасыtený ketón možno *in situ* zachytiť reakciou s elektrofilom. Výhoda tandemových reakcií je tvorba C-C a C-N väzieb a vytvorenie dvoch alebo viacerých susediacich stereogénnych centier použitím jednoduchého katalyzátora v one-pot reakcii. Nedávno boli publikované práce, v ktorých skúmajú reakcie zinočnatých enolátov s imínmi.[1]

Feringa a kol. publikovali konjugované adície Grignardových činidiel na enóny.[2] Zistili sme, že horečnaté enoláty reagujú v one-pot reakcii s imínmi a vznikajú β -aminokarbonylové zlúčeniny s tromi stereogénnymi centrami.[3] Cieľom práce je preskúmať vplyv chrániacej skupiny na imíne na chemický výťažok reakcie, diastereo- a enantioselektivitu.



Sch. 1 Adícia Grignardovho činidla na cyklohex-2-enón s následnou reakciou elektrofilu

Pri adíciach Grignardových činidiel na α,β -nenасыtené karbonylové zlúčeniny s následnou reakciou s rôznymi imínmi ako elektrofilnými činidlami boli izolované produkty s dobrou enantioselektivitou (do 96% *ee*) a diastereoselektivitou 1:1 až 1:5 v závislosti od chrániacej skupiny imínu.

Ďakujeme za finančnú podporu Slovenskej grantovej agentúry VEGA; č. Grantu 1/0265/09.

[1] Gonzalez-Gomez, J.C., Foubelo, F., Yus, M.: *J. Org. Chem.*, (2009) b) Guo, S., Xie, Y., Hu, X., Xia, C., Huang, H.: *Angew. Chem. Int. Ed.*, (2010)

[2] Feringa, B.L., Badorrey, R., Pena, D., Harutyunyan, S.R., Minnaard, A.J.: *Proc. Nat. Acad. Sci.*, (2004)

[3] Šebesta, R., Bilčík, F., Fodran, P.: *Eur. J. Org. Chem.*, (2010)

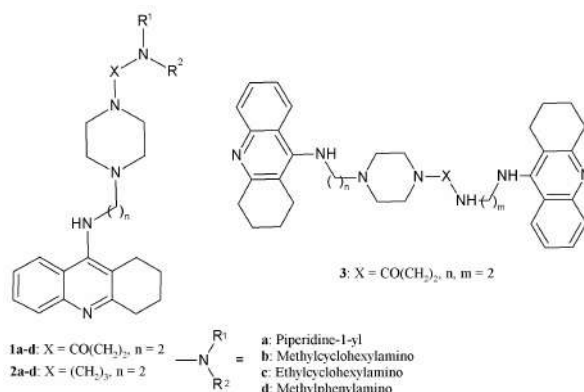
3Po23 NOVEL TACRINE DERIVATIVES CHARACTERIZED BY HIGH POTENT INHIBITION OF ACETYLCHOLINESTERASE APPROPRIATE FOR TREATMENT OF ALZHEIMER'S DISEASE

Slávka Hamuláková¹, Ladislav Janovec¹, Kamil Kuča², Pavol Kristian¹, Mária Baňasová¹, Ján Imrich¹

¹ P. J. Šafárik University, Faculty of Science, Institute of Chemistry, SK-04167 Košice, Slovak Republic, slavka.hamulakova@upjs.sk

² University of Defence, Faculty of Military Health Sciences, Center for Advanced Studies, CZ-50001 Hradec Králové, Czech Republic

Alzheimer's disease (AD) is a multifaceted neurodegenerative disorder characterized by progressive deterioration of memory and cognition [1]. In this study, new tacrine derivatives **1a-d**, **2a-d**, and homodimeric hybrid **3** based on the concept of dual-binding to acetylcholinesterase (AChE) were designed, synthesized, and tested for their ability to inhibit AChE. The compounds represent a new type of therapeutic agents which may be used for the effective treatment of AD and prevention of A β aggregation [2]. All newly prepared compounds showed a potent human acetylcholinesterase (hAChE) inhibition. The derivative **1c**, obtained from 3-chloro-1-{4-[2-(1,2,3,4-tetrahydroacridin-9-ylamino)ethyl]piperazin-1-yl}propan-1-one and ethylcyclohexylamine, reaching the best hAChE inhibitory activity (IC₅₀ = 4.97 nM). IC₅₀ values determined for inhibitors **1a-d** and **2a-d** were compared with two dissociation constants, K_{i1} and K_{i2} , of an enzyme-inhibitor complex and enzyme-inhibitor-substrate complex, respectively. To assess an inhibition mode, docking of the most active derivatives **1b**, **1c**, **2b** into the pertinent hAChE crystal structure was carried out.



Obř. 1 Chemical structure of tacrine derivatives **1a-d**, **2a-d** and homodimeric hybrid **3**

The work was supported by the Grant Agency VEGA (grants 1/0672/11, 1/0179/11), the State NMR program (grant No. 2003SP200280203) and the Grant Agency of the Ministry of Defence of the Czech Republic (grant P303/11/1907).

[1] Robert, P.; Ferris, S.; Gauthier, S. S.; Ihl, R.; Winblad, B.; Tennigkeit, F. *Alzheimer's Research & Therapy* **2010**, 2, 2-13.

[2] Butini, S.; Guarino, E.; Campiani, G.; Brindisi, M.; Coccone, S. S.; Fiorini, I.; Novellino, E.; Belinskaya, T.; Saxena, A.; Gemma, S. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2008**, 18, 5213-5216.

3Po24 KOMPOZITNÍ MATERIÁLY NA BÁZI SYNTETICKÉHO HYDROGELU A BAKTERIÁLNÍ CELULÓZY

Radka Hobzová¹, Miroslava Dušková-Smrčková¹, Zenya Karpushkin¹, Jiří Michálek¹, Paul Gatenholm²

¹ Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 2, 162 06, Praha

² Department of Chemical nad Biological Engineering/Biopolymer Technology, Chalmers University of Technology, Gothenburg, Sweden hobzova@imc.cas.cz

Syntetické hydrogely představují důležitou skupinu materiálů nacházející uplatnění v řadě biomedicinských oborů včetně tkáňového inženýrství. Jejich předností je, že jsou netoxické a kompatibilní s živou tkání. Na druhou stranu ale často vykazují nedostačující mechanické vlastnosti. Do popředí zájmu se proto dostávají hydrogely se sofistikovanější strukturou např. nanokompozity nebo hydrogely se strukturou dvojité sítě [1]. V analogii s některými přírodními tkáněmi se jako atraktivní jeví kompozity na bázi syntetického hydrogelu a přírodního vláknitého materiálu. Z tohoto pohledu vzbudila značný zájem bakteriální celulóza (BC), která je produkována bakteriemi v podobě 3-

dimenzionální sítě o průměru vláken přibližně 100 nm.

V této práci byla připravena sérii kompozitních materiálů BC-methakrylátový hydrogel pomocí UV polymerizace směsi monomer/síťovadlo impregnované do vláknité struktury BC. Byl sledován vliv chemické struktury a stupně hydrofilicity monomeru na vlastnosti kompozitů, a to zejména na botnavost a mechanické vlastnosti. Připravené kompozity vykazovaly výrazně vyšší mechanickou odolnost vůči smykovému a tlakovému namáhání v porovnání s BC nebo hydrogelovou maticí. Získané hodnoty modulů v tlaku v řádu jednotek MPa jsou srovnatelné s hodnotami modulů některých lidských kloubních chrupavek. Volbou chemického složení a reakčních podmínek tak lze nastavit požadované vlastnosti s ohledem na jejich potenciální aplikaci.

Autoři děkují MŠMT za finanční podporu poskytnutou v rámci projektu č. 1M 053.

[1] Jeremiah A. Johnson, Nicholas J Turro, Jeffrey T. Koberstein, James E Mark: Prog Polym Sci (2010)

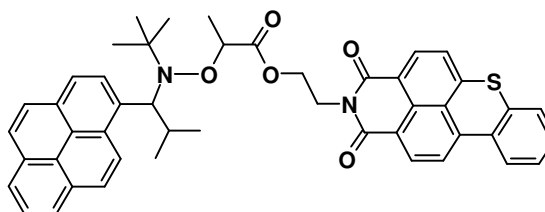
3Po25 VYUŽITIE FLUORESCENCIE PRE URČENIE ROZSAHU „ŽIVOSTI“ NITROXIDMI REGULO-VANEJ RADIKÁLOVEJ POLYMERIZÁCIE

Ľudmila Hrčková, Štefan Chmela, Jozef Kollár

Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 845 41
Bratislava, Slovensko upolchme@savba.sk

Kontrolovaná tzv. „živá“ radikálová polymerizácia regulovaná stabilnými nitroxidmi resp. alkoxyamínmi umožňuje jednoduchú prípravu homopolymérov s nízkym stupňom polydisperzity, ktoré majú výrazne lepšie fyzikálne a chemické vlastnosti a môžu byť použité ako makroiniciátory pre syntézu blokových kopolymérov. Doteraz bolo všeobecne akceptované, že rozsah „živosti“ procesu je vysoký pre všetky konverzie. Pri radikálovej polymerizácii styrénu a akrylátov je však možná aj termická iniciácia. Za účelom kvantifikácie počtu polymérnych reťazcov vznikajúcich pôsobením iniciátora a samozrejme aj pre určenie rozsahu živosti procesu sme sa zamerali na regulátory, ktoré obsahujú štruktúrnú jednotku alkoxyamínu v kombinácii s dvoma rôznymi chromofórmi. Jeden by mal značiť začiatok polymérneho reťazca a druhý aktívny koniec, schopný ďalšieho rastu. Výber primeraných chromofórov, ktoré absorbujú a emitujú žiarenie

pri rozličných vlnových dĺžkach je dôležitý, pretože na základe kvantifikácie absorpcie, resp. emisie sme schopní určiť množstvo značených polymérových reťazcov buď na oboch koncoch alebo iba na začiatku a konci reťazca. Bežne používané deriváty 2,2,6,6-tetrametylperidínu (TEMPO) nie sú schopné regulovať polymerizácie akrylátov. Preto sme sa zamerali na prípravu alkoxyamínu, ktorý je štruktúrne podobný 2,2,5-trimetyl-4-phenyl-3-azahexán-3-nitroxidu (TIPNO). Bol zosyntetizovaný a spektrálne charakterizovaný derivát nasledovnej štruktúry:



Jeho použitie pri kontrolovanej radikálovej polymerizácii umožnilo kvantifikovať rozsah značených počiatkov a koncov polymérnych reťazcov.

Táto práca vznikla za finančnej podpory projektov APVV- 0109-10 a VEGA 2/0072/11.

3Po26 PREKURZORY POLYMERNÍCH NOSIČŮ LÉČIV PŘIPRAVENÉ ŘÍZENOU RADIKÁLOVOU RAFT POLYMERACÍ

Petr Chytil, Tomáš Etrych, Karel Ulbrich

Ústav makromolekulární chemie, AV ČR,
v.v.i. Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6, Česká
republika, (chytil@imc.cas.cz)

Kopolymery na bázi *N*-(2-hydroxypropyl)methakrylamidu (HPMA) jsou často používány jako polymerní prekurzory při přípravě vodorozpustných polymerních konjugátů s léčivy. Konjugáty s protinádorovým léčivem doxorubicinem, navázaným pH-senzitivní hydrazonovou vazbou, prokázaly značnou účinnost při léčbě modelového nádorového onemocnění - myšího EL4 lymfomu.¹ HPMA kopolymery byly dosud připravovány běžnou radikálovou polymerací, vedoucí k polydisperzitám 1,7 – 2. Použitím řízené radikálové RAFT polymerace je však možné připravit kopolymery jak s úzkou distribucí molárních hmotností, tak s dobře definovanou strukturou, zejména co se týče koncových skupin polymerních řetězců. V této prezentaci

představujeme syntézu a fyzikálně-chemické vlastnosti multivalentních (semi)telechelických HPMA kopolymerů – prekurzorů pro přípravu pokročilých polymerních nosičů léčiv. Kopolymery obsahovaly (Boc skupinou) chráněné amino nebo hydrazidové skupiny podél polymerních řetězců a koncové karboxylové, amino či thiazolidin-2-thionové skupiny (vhodné pro aminolytické reakce), maleimidové či pyridyldithio skupiny (vhodné pro reakci s thioley). Kopolymery se vyznačovaly dobře definovanou strukturou (s funkcí koncových skupin blízké 1) a úzkou distribucí molárních hmotností (přibližně 1,1 - 1,2). Jako příklad jejich použití jsou představeny biodegradovatelné vysokomolekulární kopolymery a jejich konjugáty s doxorubicinem, určené pro vysoce účinnou léčbu pevných nádorů.

Tato práce byla podporována postdoktorským grantem GA ČR č. P207/11/P551

- [1] Etrych T. et al., *Macromol. Biosci.* (2002) 2, 43-52; Etrych T. et al., *J. Appl. Polym. Sci.* (2008) 109(5), 3050-3061; Šírová M. et al., *Pharm. Res.* (2010) 27 (1), 200-208.

3Po27

KARBAMÁTY SALICYLANILIDŮ JAKO INHIBITORY ACETYLCHOLINESTERÁZY A JEJICH MOLEKULÁRNÍ DOCKING

Aleš Imramovský¹, Šárka Štěpánková², Juana Monreal Ferriz³, Jarmila Vinšová³, Ján Vančo⁴, Josef Jampílek⁴

¹Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 75, 532 10 Pardubice, Česká Republika

²Katedra biologie a biochemických věd, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 75, 532 10 Pardubice, Česká Republika

³Katedra anorganické a organické chemie, Farmaceutická fakulta, Univerzita Karlova, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, Česká republika

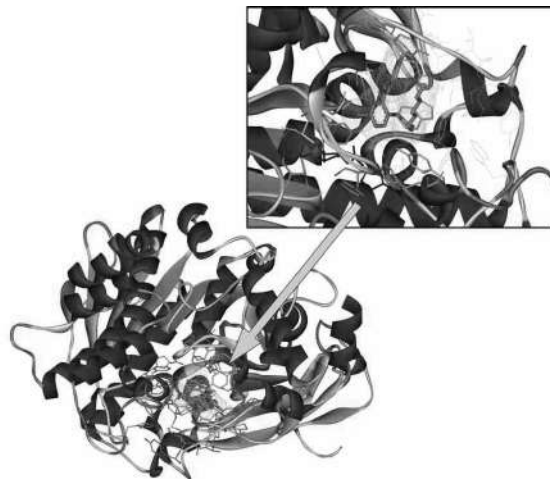
⁴Ústav chemických léčiv, Farmaceutická fakulta, Veterinární a farmaceutická univerzita Brno, Palackého 1/3, 612 42 Brno, Česká republika

Alifatické karbamáty salicylanilidů jsou vysoce aktivní sloučeniny proti multilékově rezistentním formám *Mycobacterium tuberculosis* (MDR-TB) s nízkou toxicitou [1]. Látky jsou ale též velmi dobrými inhibitory (tzv. PET inhibitory) fotosyntézy ve špenátu (*Spinacia oleracea* L.), kde působí v akceptorové části PS 2 [2].

Tyto molekuly také velmi dobře inhibují cholinergní enzym acetylcholin esterázu (AChE)

20-70 $\mu\text{mol/l}$ a tím výrazně převyšují standard Rivastigmin. Pro objasnění inhibice těchto sloučenin byla použita Krystalová struktura myši AChE fosfonylované sarinem, s navázaným inhibitorem HI-6, získaná x-ray difrakční analýzou s rozlišením 2,15Å (PDB ref. 2WHQ). Na výpočtové ověření nejvyšší afinity testovaných látek k aktivnímu centru AChE byly použity programy Autodock Vina 1.1 a Autodock 4.2.3 (Scripps Inc.), integrovaný do softwarového nástroje pro virtuální screening PyRx 0.8. V druhé fázi, pro detailnější zhodnocení orientace ligandů v aktivním centru byli použity výsledky dockování v programech Autodock Vina 1.1 a Autodock 4.2.3 pro dokování do identifikovaného aktivního místa pak v programu Gold 5.0 (CCDC).

V příspěvku budou prezentovány inhibiční vlastnosti vybraných karbamátů, jejich toxické vlastnosti a docking nejvíce aktivních sloučenin.



Obř. 1 Interakce 2-(4-chlorophenylcarbamoyl)-4-chlorophenyl hexylcarbamate s aktivním místem AChE – molekulární docking.

Autoři děkují za finanční podporu Ministerstvu školství mládeže a tělovýchovy České Republiky MSN 0021627501.

- [1] Monreal, J. F.; Vávřová, K.; Kunc, F.; Imramovský, A.; Stolařková, J.; Vavřřková, E.; Vinšová, J. Salicylanilide carbamates: Antitubercular agents active against multidrug-resistant *Mycobacterium tuberculosis* strains. *Bioorg. Med. Chem.*, **2010**, *18*, 1054–1061.
- [2] Imramovsky, A., Peško, M., Ferriz, J.M., Krařova, K., Vinšova, J., Jampílek, J., Photosynthesis-Inhibiting Efficiency of 4-Chloro-2-(chlorophenylcarbamoyl)phenyl alkylcarbamates, *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters* (2011), doi: 10.1016/j.bmcl.2011.05.118

3Po28 IZOTERMICKÁ KRYŠTALIZÁCIA PCL/MMT KOMPOZITOV

Ivica Janigová¹, Daniela Johec-Mošková¹, Ivan Chodák¹

¹Ústav polymérov, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava 45, upoljani@savba.sk

Fyzikálne a mechanické vlastnosti kryštalických polymérov závisia vo veľkej miere na morfológii a štruktúre kryštalitov a na stupni kryštalizácie. Z literatúry je známe, že dispergovaný organicky modifikovaný montmorillonit (MMT) pôsobí v matrici polyméru ako nukleačné činidlo [1,2], dochádza k nárastu celkovej rýchlosti kryštalizácie (v_c) a skracuje sa počas kryštalizácie ($t_{0,5}$) už pri nízkych koncentráciách plniva (do 1 hm.%). Vrstevnatá štruktúra MMT umožňuje vhodnou modifikáciou pri zamiešaní do polymérnej matrice interkaláciu, resp. exfoliáciu jednotlivých vrstiev, čím sa zväčšuje nukleačná schopnosť plniva.

Tento príspevok je zameraný na štúdium izotermickej kryštalizácie kompozitov a/alebo nanokompozitov na báze biodegradovateľného polykapolaktónu (PCL) pripravených konvenčným miešaním v tavenine. Porovnával sa vplyv troch komerčných typov MMT, organicky modifikovaných rôznymi amóniovými kationmi (Cloisit 15A a Cloisit 10A a nemodifikovaný Cloisit Na, koncentračný rozsah 1-10 hm.%) na parametre izotermickej kryštalizácie PCL. Štúdium morfológie uvedených kompozitov pomocou transmisnej elektrónovej mikroskopie a röntgenovej difrakcie v predchádzajúcej práci [3] ukázalo prítomnosť interkalovaných a exfoliovaných štruktúr v kompozitoch. Izotermická kryštalizácia sa sledovala metódou DSC pri teplotách 41 až 47°C. Získané výsledky celkovej rýchlosti kryštalizácie a počasu kryštalizácie viedli k predpokladu súčasného pôsobenia dvoch javov – nukleácie a retardácie počas procesu kryštalizácie. Prevládanie jedného z efektov prebieha v závislosti od obsahu plniva vo vzorkách. Intenzita efektov koreluje s veľkosťou povrchu a stupňa exfolácie plniva v matrici.

Prítomnosť všetkých typov MMT akcelerovala kryštalizáciu polyméru v celom teplotnom rozsahu. Hodnoty celkovej rýchlosti kryštalizácie a tepla uvoľneného počas kryštalizácie boli vyššie a hodnoty počasu kryštalizácie nižšie ako pre pôvodný polymér.

Autori ďakujú za finančnú podporu Slovenskej chemickej spoločnosti. Ďakujeme všetkým priaznivcom a tešíme sa na Vás vo Vysokých Tatrách.

- [1] E. Di Maio, S. Innanca, L. Sorrentino, L. Nicolais: *Polymer* 45, 8893 (2004)
- [2] D. Homminga, B. Goderis, I. Dolbnya, G. Groeninckx: *Polymer* 47, 1620 (2006)
- [3] I. Janigová, F. Lednický, D. Johec-Mošková, I. Chodák: *Macromolecular Symposia* 301, 1 (2011)

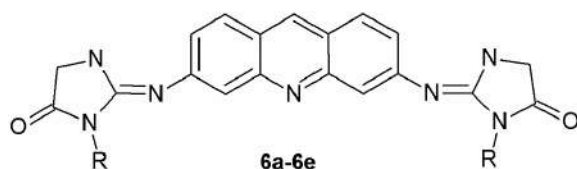
3Po29 SYNTHESIS, DNA BINDING, AND MOLECULAR MODELING OF CYTOTOXIC 3,6-BIS(IMIDAZOLIDINONE) ACRIDINES

Ladislav Janovec¹, Mária Kožurková², Danica Sabolová², Ján Ungvarský¹, Helena Paulíková³, Jana Plšíková², Zuzana Vantová³, Pavol Kristian¹, Ján Imrich¹

¹Department of Organic Chemistry, ²Department of Biochemistry, Institute of Chemistry, Faculty of Science, P.J. Šafárik University, Moyzešova 11, SK-04167 Košice, Slovak Republic, ladislav.janovec@upjs.sk

³Department of Biochemistry and Microbiology, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak Technical University, Radlinského 9, SK-81237 Bratislava, Slovak Republic

New acridine derivatives bearing two symmetrical imidazolidinone rings, 3,6-bis((1-alkyl-5-oxo-imidazolidin-2-ylidene)imino)acridines **6a-6e** (alkyl = ethyl, *n*-propyl, *n*-butyl, *n*-pentyl, *n*-hexyl), were prepared and their biological properties were studied. A binding of **6a-6e** to calf thymus DNA was examined by UV-Vis, fluorescence, and CD spectroscopy. The binding constants determined by UV-Vis spectroscopy were found in the range $1.9 \times 10^5 - 7.1 \times 10^5 \text{ M}^{-1}$. Electrophoretic separation proved that ligands **6a-6e** inhibited topoisomerase I in 40 μM concentration although only those with longer alkyl chains were able to penetrate the membranes and efficiently suppress the cell proliferation. The most active in cytotoxic tests was 3,6-bis((1-*n*-hexyl-5-oxo-imidazolidin-2-ylidene)imino)acridine (**6e**) with $\text{IC}_{50} = 2.12 \pm 0.21 \mu\text{M}$ (HL 60 cell line) after 72 h incubation. Molecular dynamics simulations and solvent-accessible surface areas (SASAs) calculations were used to explore an intercalation mechanism. Molecular dynamics simulations favor stacking between adjacent C:G base pairs from a minor groove side and SASAs calculations predict a loss of entropy as the driving force for the complex stability [1].



Financial support from the Slovak Grant Agency VEGA (grants 1/0053/08, 1/0476/08, 1/0097/10), the State NMR Program (grant No. 2003SP200280203) and The Internal Grant Program of the P. J. Šafárik University in Košice (VVGs No. 7/09-10) are gratefully acknowledged.

[1] Janovec, L.; Kožurková, M.; Sabolová, D.; Ungvarský, J.; Paulíková, H.; Plšíková, J.; Vantová, Z.; Imrich, J. *Bioorg. Med. Chem.* 19, 1790 (2011)

3Po30

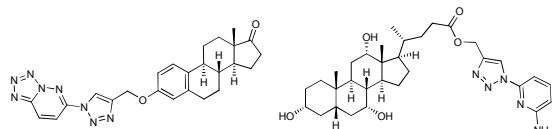
RECEPTORY KOVOVÝCH KATIONTŮ ODVOZENÉ OD ESTRONU, MESTRANOLU A KYSELINY CHOLOVÉ

Michal Jurášek^{a1}, Hanka Dvořáková^b, David Sedlák^c, Pavel Drašar^{*a2} a Zdeněk Wimmer^{a3}

^aÚstav chemie přírodních látek, VŠCHT Praha, Technická 5, Praha 6, michal.jurasek@gmail.com^{a1}, drasarp@vscht.cz^{a2}, wimmerz@vscht.cz^{a3}, ^bCentrální laboratoře, VŠCHT Praha, Technická 5, Praha 6, dvorakovh@vscht.cz, ^cÚstav molekulární genetiky AV ČR, Vídeňská 1083, Praha 4, david.sedlak@img.cas.cz.

Kovy komplexující ligandy mají své využití v konstrukcích dobře definovatelných, rozsáhlých supramolekulárních struktur s mnoha zajímavými vlastnostmi jako jsou optické, magnetické či elektrochemické aspekty. Mezi jiné patří například reversibilní vazebné interakce mezi ligandem a hostem [1]. Pro stadium interakcí tohoto typu byla použita jako steroidní základ kyselina cholová. Schopnost samoskladby těchto molekul byla studována jak v přítomnosti aniontů tak kationtů. Analogické konjugáty estronu a mestranolu jakožto estrogenů mají potenciál k interakci s estrogenními nukleárními receptory (ER α/β).

Pro syntézu receptorů byla využita 1,3-dipolární Huisgenova [2] cykloadice terminálních alkyňů a azidů či tetrazolů. Nově připravené struktury byly plně charakterizovány NMR, MS-ESI⁺, FT-IR a UV-VIS. V současné době jsou studovány jak biologické profily tak analytické chování těchto látek.



Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR MSM6046137305, 2B06024 (SUPRAFYT).

[1] U. S. Schubert, C. Eschbaumer: *Angew. Chem.*

2002, 114, 3016; *Angew. Chem.* 2002, 41, 2892.
[2] Huisgen R.: *Andrew. Chem., Int. Ed.* 1963, 2, 565.

3Po31

SVETLOM IMOBILIZOVANÝ ZWITTERIÓNOVÝ POLYMÉR

Peter Kasák,^{1*} Patrik Sobolčiak,¹ Dušan Chorvát, Jr.,^{1,2} Monika Lahová,³ Igor Lacík¹

¹ Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, peter.kasak@savba.sk

² Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičová 3, 812 19 Bratislava,

³ Virologický ústav SAV, Dúbravská cesta 9, 845 05 Bratislava,

Polyzwitterióny sú polyméry, ktoré obsahujú vnútorné soli v monomérskej jednotke a vďaka tejto štruktúre majú jedinečné vlastnosti [1]. Pozitívne nabitá skupina je zväčša kvartérna amóniíová skupina a negatívne nabitými skupinami môžu byť sulfátová, karboxylová alebo fosfátová skupina. Podobnosť v štruktúre a v správaní sa polyzwitteriónov ku biopolymérom a biomembránam umožňuje pripravovať materiály s biomimetickými vlastnosťami. Modifikácia povrchov s zwitteriónovými polymérmi spôsobuje dramatické zníženie biozánášania [2]. Jednou z možností modifikácie povrchov je využitie svetelného žiarenia ako nástroja na imobilizáciu polyméru s fotolabilnou jednotkou [3].

V tomto príspevku predstavíme prípravu a využitie kopolymérov obsahujúcich zwitterionové jednotkami zaručujúce biokompatibilitu a fenylazidové jednotky, ktoré sú fotolabilné. Po nanosení a fotoimobilizácii takýchto kopolymérov na nekompatibilné povrchy ako je polystyrén, polyester a polyetylén sa znížila nešpecifická adsorpcia proteínov ako sú fibrinogén a albumín z ľudského séra a taktiež sa zredukovala adhézia fibroblastov BHK21. Tiež bude prezentovaná možnosť využitia fotomasky a jej vplyvu na vzorovanie povrchu ako aj možnosť prípravy vrstvy o rôznej hustote a hrúbke.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APVV-0486-10., projektom VEGA No. 2/0152/10 a realizáciou projektu Centrum pre Materiály, vrstvy a systémy pre aplikácie a chemické procesy v extrémnych podmienkach - Etapa II na základe podpory operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja.

[1] Banerjee I, Pangule RC, Kane RS. *Adv. Mater.* 2011; 23, 690-718

- [2] Chen S., Li L., Zhao Ch. Zheng J. *Polymer* **2010**, 51, 5283-5293.
 [3] Truskett VN., Watts MPC, *Trends in Biotechnology* **2006**, 24, 312-317.

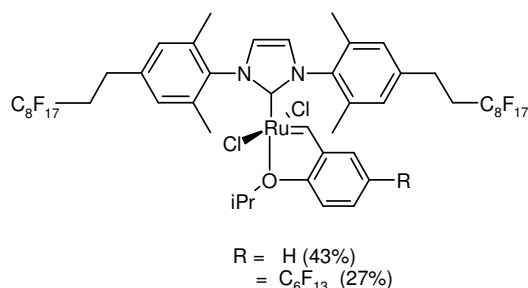
3Po32 FLUOROVANÉ HOVEYDOVY-GRUBBSOVY KATALYZÁTORY A JEJICH VLIV NA METATEZI ALKENŮ

Vendula Kelbichová¹, Mario Babuněk¹, Martin Schindler¹, Markéta Rybáčková¹, Jaroslav Kvíčala¹

Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika
 vendyk@atlas.cz

Grubbsovy a Hoveydovy-Grubbsovy katalyzátory jsou nejvýznamnějšími homogenními katalyzátory metateze alkenů. Zejména tyto komplexy 2. generace, které obsahují místo tricyklohexylfosfanového ligandu NHC ligand, se vyznačují vysokou aktivitou a zvýšenou stabilitou v přítomnosti kyslíku nebo vody.

V naší laboratoři se zabýváme syntézou fluorovaných variant těchto komplexů. Nejprve jsme syntetizovali příslušné imidazoliové a dihydroimidazoliové soli, sloužící jako prekurzory NHC. Současně jsme připravili vhodné isopropoxystyreny. Následovala komplexace NHC připravených z imidazoliových a dihydroimidazoliových solí působením báze. Přidáním isopropoxystyrenu byly připraveny fluorované varianty Hoveydova-Grubbsova katalyzátoru 2. generace (viz Obr. 1).



Obr. 1: Fluorované varianty Hoveydova-Grubbsova katalyzátoru 2. generace, připravených v naší laboratoři

Na modelových substrátech, kterými byly diethylestery diallyl-, allylmethylal a dimethylmalonátu, jsme sledovali katalytickou aktivitu získaných komplexů při RCM. Pro fluorované varianty Hoveydových-Grubbsových komplexů 2. generace s nenasycenými NHC ligandy jsme studovali možnost jejich recyklace s využitím extrakce pevnou fází.

- [1] M. Matsugi, D. P. Curran, *J. Org. Chem.*, 2005, 70, 1636-1642.

- [2] R. Correa da Costa, J. A. Gladysz, *Adv. Synth. Catal.*, **2007**, 349, 243-254.

3Po33 SYNTHESIS OF TRIARYLAMINE PRECURSORS FOR OPTOELECTRONIC MATERIALS

Lukáš Kerner, Martin Putala

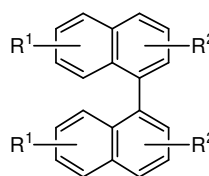
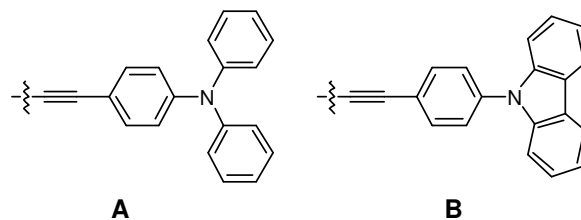
Department of Organic Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University in Bratislava, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, Slovak Republic,
 kerner@fns.uniba.sk

Organic light emitting diodes (OLEDs) possess a number of advantageous properties over their inorganics-based counterparts. They have potential to exhibit both higher brightness and efficiency, better render the color spectrum at wide viewing angles while working at low applied voltages and for very long time (well over 10,000 hours) [1].

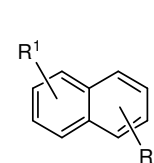
Based on known good hole-transporting properties of bi- and triarylamines [2], we designed a series of naphthalene and binaphthalene derivatives **1-8** with triarylamine groups attached via ethynylene linker intended for applications in OLEDs and organic field-effect transistors (OFETs).

We plan to synthesise diphenylamino derivatives **1, 3, 5, 7** and contrast their electronic properties with those of carbazole containing compounds **2, 4, 6, 8**. In order to increase solubility of target substances, hexyloxy groups may be incorporated in their structures (**3, 4, 7, 8**).

Different synthetic approaches towards triarylaminoethyne precursors **AH** and **BH** together with optimized procedures and reaction conditions will be presented.



1: R¹ = R² = **A**
2: R¹ = R² = **B**
3, 4: R¹ = **A** or **B**
 R² = C₆H₁₃O



5: R¹ = R² = **A**
6: R¹ = R² = **B**
7, 8: R¹ = **A** or **B**
 R² = C₆H₁₃O

- [1] Waser, R. (Ed.) *Nanoelectronics and Information Technology 2nd Ed.*, Wiley-VCH: Weinheim, **2005**.
- [2] Ning, Z.; Tian, H. *Chem. Commun.* **2009**, 5483-5495.
- [3] Thelakkat, M. *Macromol. Mater. Eng.* **2002**, 287, 442-461.

3Po34 STUDY OF PHYSICO-CHEMICAL AND BIOLOGICAL PROPERTIES OF ZINC(II) 2-CHLORO-BENZOATE COMPLEXES

^aLenka Findoráková, ^bJana Kovářová, ^aKatarína Györyová, ^cDaniela Hudecová, ^dDagmar Mudroňová,

^a*Institute of Chemistry, P. J. Šafárik University, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovakia*

^d*Institute of Macromolecular Chemistry AS CR, v.v.i. Heyrovsky Sq. 2, 162 06 Prague 6, Czech Republic, kovarova@imc.cas.cz*

^c*Department of Biochemistry and Microbiology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia*

^d*Department of Microbiology and Immunology, University of Veterinary Medicine and Pharmacy, Komenského 73, 041 81 Košice, Slovakia*

Heterocyclic compounds of zinc play important role in many biological systems, especially those with N-donor ligands form the component of some vitamins and drugs [1].

In a continuation of our previous study of zinc benzoates with organic ligands [2-3], in this work new zinc(II) 2-chlorobenzoates of general formula $Zn(2-ClC_6H_4COO)_2 \cdot L_2$ (L = caffeine, urea, methyl-3-pyridylcarbamate, phenazone, theophylline) were synthesized and characterized by elemental analysis and FTIR. Thermal behaviour was studied by TG/DTG and DTA in nitrogen and in air. During the thermal decomposition of the complexes the release of organic ligands take place followed by the decomposition of 2-chlorobenzoate anion. The volatile intermediates were proved by means of mass spectroscopy. Zinc oxide was found as the final product of the decomposition performed up to 700 °C. The antimicrobial activity of the zinc (II) complexes against various strains of bacteria, yeasts and filamentous fungi was investigated. It was found, that the presence of ligands and zinc in the prepared compounds increased the inhibitory effect compared to their sodium salt derivatives and free ligands. The free ligands did not influence the growth of the bacteria.

- [1] H. Icbudak, Z. Heren, D. Ali Kose, H. Necefoglu, *J. Therm. Anal. Calorim.* **76**, 837 (2004).
- [2] L. Findoráková, K. Györyová, J. Kovářová, V. Balek, F. A. Nour El-Dien, L. Halás, *J. Therm.*

Anal. Calorim., **95**, 923 (2009).

- [3] L. Findoráková, K. Györyová, E. Večerníková, V. Balek, *J. Therm. Anal. Calorim.* **98**, 765 (2009).

3Po35 OPTIMALIZÁCIA POLYMÉRNÝCH MIKROKAPSÚL PRE IMUNITNÚ OCHRANU TRANSPLANTOVANÝCH LANGERHANSOVÝCH OSTROVČEKOV

Gabriela Kolláriková¹, Peter Kasák¹, Dušana Mocinecová¹, Anne Mari Rokstad², Terje Espevik², Igor Lacík^{1*}

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

²*Nórska univerzita pre vedu a technológiu, Oddelenie výskumu rakoviny a molekulárnej medicíny, 7491 Trondheim, Nórsko*

Imunitná ochrana pankreatických ostrovčekov pomocou enkapsulácie je jednou zo stratégií v liečbe cukrovky. Jej hlavnou výhodou je, že pacient je bez imunosupresívnej podpory, ktorá je spojená s nežiaducimi účinkami. Táto stratégia je už dobre zavedená, ale mikrokapsule, ktoré by splňali všetky nutné požiadavky ešte neboli vyvinuté. Primárnou požiadavkou je dostatočná biokompatibilita mikrokapsúl, ktoré po transplantácii nesmú významne stimulovať imunitný systém príjemcu čo sa typicky prejavuje obrastaním transplantovaných mikrokapsúl fibrotickým tkanivom.

Mikrokapsule tvorené polyelektrolytovou komplexáciou za použitia alginátu sodného, sulfátu celulózy a poly(metylén-ko-guanidín)hydrochloridu (PMCG) boli testované na transplantácie ostrovčekov v rôznych zvieracích modeloch s cieľom získať dáta pre predklinickú validáciu. Tieto testy boli iniciované úspešnými transplantačnými pokusmi do primátov, v ktorých explantované PMCG mikrokapsule po viac ako 4 mesiacoch vykazovali dostatočnú biokompatibilitu. Predklinická validácia PMCG mikrokapsúl nebola dokončená kvôli *ex vivo* výsledkom v kompletnej ľudskej krvi, ktoré ukázali, že PMCG mikrokapsule stimulujú ľudský imunitný systém.

Naším cieľom je ukázať ako rôzne polyelektrolyty a podmienky týkajúce sa koncentrácií polyelektrolytov budú vplyvať na mechanizmus tvorby mikrokapsúl a ich vlastností ako je biokompatibilita, priepustnosť, mechanická a chemická stabilita. Modifikáciou protokolu prípravy mikrokapsúl a polyelektrolytov sa pokúsime optimalizovať mikrokapsule s cieľom

dosiahnúť ich vyššiu biokompatibilitu so žiadnou alebo len minimálnou stimuláciou ľudského imunitného systému.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APVV-0486-10. Príspevok bol tiež vytvorený realizáciou projektu Centrum pre Materiály, vrstvy a systémy pre aplikácie a chemické procesy v extrémnych podmienkach - Etapa II na základe podpory operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja, medzinárodným programom pre funkčnú liečbu cukrovky The Chicago Diabetes Project a grantom EFSD Nové horizonty.

3Po36

DONOR - ACCEPTOR ORGANIC SEMICONDUCTORS BASED ON DERIVATIVES OF DI(2-THIENYL)TETRAZINE AND DI(2-THIENYL)THIA DIAZOLE

E. Kurach¹, K. Kotwica¹, J. Rimarčík², V. Lukeš², D. Djurado³, M. Zagorska¹, A. Pron³

¹Faculty of Chemistry, Warsaw University of Technology, Warsaw, Poland

²Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics, Slovak University of Technology in Bratislava, Bratislava, Slovakia

³INAC/SPrAM (UMR 5819 CEA-CNRS-Univ. J. Fourier-Grenoble 1)LEMOH, Grenoble, France

Using palladium catalyzed cross-coupling reactions, we have synthesized several molecular semiconductors consisting of electron accepting central core (tetrazine or thiadiazole unit) and electron donating (alkylthienyl or alkylbithienyl) substituents. The obtained compounds have been characterized by spectroscopic, electrochemical and spectroelectrochemical methods. The electrochemically determined HOMO and LUMO levels and spectroscopically measured optical transitions have been compared with those obtained from quantum chemical calculations (DFT).

Molecules β -substituted with alkyl groups were electropolymerized yielding a new class of conjugated polymers (Fig. 1). Poly[2,5-bis(3'-octyl-2,2'-bithien-5-yl)-1,3,4-thiadiazole] can be reversibly oxidized at positive potentials but show no electrochemical activity at negative potentials down to -1.5 V vs Fc/Fc⁺). The polymer obtained by electropolymerization of bis[3'(or 4')-octyl-2,2'-bithien-5-yl]-1,2,4,5-

tetrazine shows dual electrochemical activity being irreversibly oxidized at positive potentials and quasi-reversibly reduced at negative ones.

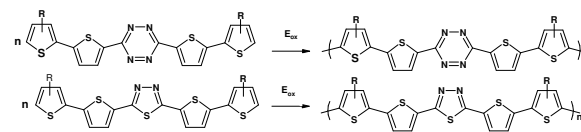


Figure 1. Structures of monomers and polymers studied. R = octyl group at β position of thiophene ring.

3Po37

DERIVÁTY 2-METHOXYBENZANILIDU A JEHO THIOXOANALOGU AKO ANTIMYKOBAKTERIÁLNE LÁTKY

Ján Kozic¹, Jarmila Vinšová¹, Jiřina Stolaříková²

¹Univerzita Karlova v Praze, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Katedra anorganické a organické chemie, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, Česká Republika

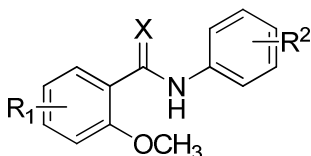
²Zdravotní ústav se sídlem v Ostravě, Partyzánské náměstí 7, 702 00 Ostrava, Česká Republika

Tuberkulóza (TBC) zostáva i v novom tisícročí závažným infekčným ochorením. V dôsledku rozširujúcej sa multiliekovej resistencie na bežne používané antituberkulotika (MDR-TBC), epidémie AIDS, migrácie obyvateľstva, nedodržiavania liečebných režimov ale i stagnácii vo vývoji nových antituberkulotík, predstavuje TBC opäť významné riziko i pre vyspelý svet. I preto je dôležité hľadanie nových antituberkulotík s novými mechanizmami účinku, pôsobiacích predovšetkým na MDR kmeny. Skupina substituovaných benzanilidov, ktoré patria k našim výskumným zámerom, tieto podmienky spĺňa [1,2].

V minulosti sme syntetizovali niekoľko derivátov salicylanilidov majúci metylovaný salicylový hydroxyl a 2-OH skupinu v anilidovej časti molekuly. Tieto zlúčeniny mali rovnakú alebo len mierne horšiu antimykobakteriálnu aktivitu v porovnaní s východiskovými salicylanilidmi [3]. Pre lepšie objasnenie vzťahu štruktúra účinnosť bolo preto pristúpené k rozšíreniu tejto skupiny ako i k príprave len metylovaných salicylanilidov. A práve syntéza druhej skupiny a ich thioanalogov bude prezentovaná.

Syntéza metylovaných salicylanilidov vychádza s príslušnej kyseliny a anilinu za použitia PCl_3 a chlorbenzenu ako rozpúšťadla. K prevedeniu amidov na thioamidy bol použitý P_4S_{10} a pyridin ako rozpúšťadlo. Použitie Lawessonova činidla sa v minulosti pri príprave thioamidov ukázalo ako

neúspešné. Celkovo bolo pripravených nasledujúcich 36 látok:



X = O, S; R¹ = 4-Cl, 5-Cl, R² = 3-NO₂, 4-NO₂, 3-Cl, 4-Cl, 3,4-di-Cl, 3-Br, 4-Br, 3-CF₃, 4-CF₃

U amidov a thioamidov budú prezentované ich antimykobakteriálne aktivity a ich zrovnanie s príslušnými salicylanilidmi.

Táto práca bola vypracovaná za finančnej podpory MSM 0021620822, GAUK 64407/2007 a IGA NS 10367-3

- [1] Vinsova J., Imramovsky A., Buchta V., Ceckova M., Dolezal M., Staud F., Jampilek J., Kaustova J.: *Molecules*. 11, 1 (2007).
- [2] Imramovsky A., Vinsova J., Ferriz J. M., Buchta V., Jampilek J.: *Bioorg. Med. Chem. Letters*. 19, 348 (2009).
- [3] Waisser, K.; Bures, O.; Holy, P.; Kunes, J.; Oswald, R.; Jiraskova, L.; Pour, M.; Klimesova, V.; Kubicova, L.; Kaustova, J.: *Arch. Pharm. Pharm. Med. Chem.* 2003, 1, 53-71.

3Po38

KORELÁCIE MEDZI ELEKTRICKÝMI A MECHANICKÝMI VLASTNOSŤAMI ELASTOMÉRU PLNENÉHO VODIVÝM PLNIVOM

Juraj Krajčí¹, Ivan Chodák¹

¹ Ústav Polymérov Slovenskej Akadémie Vied, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava
juraj.krajci@savba.sk

Vodivé polymérne kompozity sú už dlhšie študované pre ich možné aplikácie v rôznych sférach ľudského života. Poznanie súvislostí medzi mechanickými a elektrickými vlastnosťami môže byť prospešné, keďže zmenu jednej z týchto veličín možno následne pozorovať druhou. V našej práci sme sa zamerali na štúdium SBR kaučuku plneného elektro vodivými sadzami, pričom kaučuk, vodivé sadze a ostatné potrebné gumárenské aditíva sme zamiešali na laboratórnom hnetiči, následne vulkanizovali v lise rôzne dlhý čas v závislosti od receptúry zmesi. Po vylisovaní sme stanovili mechanické vlastnosti a následne sme sledovali zmeny prúdu pretekajúceho vzorkou pri konštantnom vložení napätí po rôznych stupňoch jednoosej deformácie, následnej relaxácie a zotavovania po uvoľnení pôsobiaceho napätia. Z nameraných výsledkov je zrejmé, že prúd so zvyšovaním

stupňa deformácie klesá, tento pokles však nie je monotónny. Pokles prúdu pretekajúceho vzorkou je zapríčinený postupným roztrhnutím vytvorených vodivých ciest (dráh), a teda zároveň obmedzením transportu elektrónov.

Detailnejšie štúdium týchto zmien pri rôznom stupni deformácie môže pomôcť pri neskoršom modelovaní mechanických a súčasne i elektrických vlastností pre konkrétne receptúry kaučukových zmesí.

Tento projekt bol podporený z APVV-51-010405 a vega 2/0185/10

3Po39

NOVÉ DERIVÁTY SULFONAMIDŮ S 5-CHLOROSALICYLALDEHYDEM A KYSELINOU 5-CHLOROSALICYLOVOU

Martin Krátký¹, Jarmila Vinšová¹, Vladimír Buchta^{2,3}, Jiřina Stolaříková⁴

¹Katedra anorganické a organické chemie, Farmaceutická fakulta University Karlovy, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, martin.kratky@faf.cuni.cz

²Ústav klinické mikrobiologie, Lékařská fakulta UK a Fakultní nemocnice Hradec Králové, Sokolská 581, 500 12 Hradec Králové

³Katedra biologických a lékařských věd, Farmaceutická fakulta University Karlovy, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové

⁴Laboratoř pro diagnostiku mykobakterií a tuberkulózu, Zdravotní ústav se sídlem v Ostravě, Partyzánské náměstí 7, 702 00 Ostrava

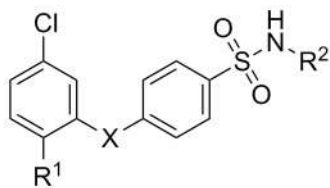
Nárůst rezistence k antimikrobním léčivům vede k nutnosti vývoje nových aktivních molekul. Jedním z přístupů je modifikace známých struktur, druhým pak může být příprava „mutual prodrugs“, tj. látek obsahujících ve své molekule dvě biologicky aktivní struktury.

Sulfonamidy jsou chemoterapeutiky, která byla v minulosti studována a využívána k léčbě bakteriálních a protozoálních chorob, ovšem jejich význam poklesl kvůli nárůstu získané rezistence původně citlivých kmenů [1]. Protože salicylanilidy (2-hydroxy-*N*-fenylbenzamid) a Schiffovy báze odvozené od salicylaldehydu (2-hydroxybenzaldehydu) též vykazují účinky vůči bakteriím, mykobakteriím a fungálním patogenům [2], připravili jsme deriváty čtyř sulfonamidů s 5-chlorosalicylovou kyselinou a 5-chlorosalicylaldehydem jako potencionální antimikrobní léčiva.

Nové sloučeniny i výchozí sulfonamidy byly hodnoceny *in vitro* vůči čtyřem Gram-pozitivním, čtyřem Gram-negativním kmenům, osmi kmenům hub, *Mycobacterium tuberculosis*, *M. avium* a

dvěma kmenům *M. kansasii*. Nejcitlivějším se ukázal *Staphylococcus aureus* a methicillin-rezistentní *S. aureus* (minimální inhibiční koncentrace – MIC $\geq 15.62 \mu\text{mol/L}$) a z mykobakterií *M. kansasii* (MIC $\geq 1 \mu\text{mol/L}$). Účinnost vůči dalším kmenům je zřetelně nižší, antimykotická aktivita je nesignifikantní.

V případě antibakteriální aktivity jsou nové deriváty vždy účinnější než parentní molekuly, ne tak u *M. tuberculosis* a *M. avium*, u *M. kansasii* není situace jednoznačná. Stejně tak nelze jednoznačně preferovat amidy či Schiffovy báze.



$R^1 = \text{OH, H}$

$X = -\text{CO}-\text{NH}-; -\text{CH}=\text{N}-$

$R^2 = \text{dusíkatý heterocyklus}$

Obr. 1 Obecná struktura připravených sloučenin

Tato práce byla podpořena granty GAUK 27610/2010, MSM 0021620822 a IGA NS 10367-3.

[1] Jerry D. Smilack: Mayo Clin. Proc., (1999)

[2] Martin Krátký, Jarmila Vinšová et al.: Eur. J. Med. Chem., (2010)

3Po40

VÝVOJ NOVÝCH REAKTIVÁTORŮ ACETYLCHOLINESTERÁZY - ANTIDOT PRO PŘÍPAD OTRAV ORGANOFOSFOROVÝMI PESTICIDY

Kamil Kuča^{1,2}, Kamil Musílek¹⁻³, Daniel Jun^{1,2}, Miroslav Pohanka¹, Jana Zdarová-Karasová², Ondřej Soukup², Jan Marek¹, Jan Korabecny¹, Martina Hrabínová¹, Jiří Kassa¹

¹ Fakulta vojenského zdravotnictví, Univerzita obrany, Hradec Králové, Česká republika

² Fakultní nemocnice, Hradec Králové, Česká republika

³ Přírodovědecká fakulta, Univerzita Hradec Králové, Hradec Králové, Česká republika

Vývoj nových reaktivátorů acetylcholinesterázy (AChE; EC 3.1.1.7) je časově velmi náročný proces. Během posledních pěti let bylo ze stovek laboratorně připravených potenciálních reaktivátorů AChE získáno několik perspektivních kandidátů, kteří jsou v současné době celosvětově testovány. Z těchto reaktivátorů lze vyzdvihnout oximy K027 a K203. První zmíněný je dle současných výsledků zvažován jako náhrada obidoximu pro léčbu otrav

organofosforovými pesticidy. Druhý, oxim K203, je v současnosti nejlepším kandidátem pro nahrazení obidoximu pro léčbu intoxikací způsobených tabunem. V této prezentaci bude představen celý vývoj nových reaktivátorů AChE a nejnovější výsledky se zaměřením na antidota pro případ otrav organofosforovými pesticidy.

Tato práce vznikla za podpory projektu Ministerstva obrany České republiky – SUBSTANCE.

3Po41

INJEKČNĚ APLIKOVATELNÉ POLYMERY PRO LOKÁLNÍ RADIOTERAPII NÁDORŮ

Jan Kučka¹, Martin Hrubý¹, Pavla Poučková², Marie Zadinová², Ondřej Lebeda²

¹Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6, Česká republika, e-mail: jkucka@centrum.cz, tel: +420 296 809 230, fax: +420 296 809 410

²Ústav biofyziky a informatiky 1. Lékařské fakulty Univerzity Karlovy v Praze, Salmovská 1, 120 00 Praha 2, Česká republika

Lokální radioterapie nádorů implantovanými zářiči (brachyterapie) je běžně užívána v klinické praxi. Termoresponsivní polymery jsou slibnými materiály pro tyto aplikace. Tyto polymery jsou totiž dobře rozpustné ve vodě při laboratorní teplotě a lze je tedy radionuklidově značit a poté injekčně aplikovat. Při teplotě těla dochází k rychlému fázovému přechodu, takže vysrážený polymer zůstává v místě aplikace. Významného zpomalení růstu až regrese nádorů bylo dosaženo jedinou intratumorální aplikací ¹³¹I -značeného poly(*N*-isopropyl akrylamidu) v dávce 2,5 MBq ¹³¹I/nádor, respektive 25 MBq ¹³¹I /nádor [1]. Nižší dávka způsobila pouze zpomalení růstu nádoru, vyšší dávka způsobila významné zmenšení objemu nádoru, oba efekty byly statisticky významné na hladině $\alpha = 0,01$. V několika případech bylo u vyšší dávky ¹³¹I pozorování i úplnému zmizení nádoru. Ačkoliv zvolený polymer není biodegradovatelný, je z místa aplikace po čase zvolna vymýván. Jak jsme prokázali [2], vylučování z organismu se děje hepatobiliární cestou a ledninami bez významných redistribucí či odštěpování radiojodu.

Autoři děkují za finanční podporu Grantové agentuře České republiky (grant č. P207/10/P054 a grant č. P208/10/1600), Grantové agentuře Akademie věd české republiky (granty č. IAAX00500803) a Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy (grant č. JM4635608802).

[1] M. Hrubý, P. Poučková, M. Zadinová, J. Kučka, O. Lebeda (2011) *Eur. J. Pharm. Sci.*, in press, doi:10.1016/j.ejps.2011.02.002

[2] J. Kučka, M. Hrubý, O. Lebeda (2010) *Appl. Radiat. Isot.* 68 (6), 1073-1078.

3Po42

BIOISOSTERE OF ROSCOVITINE, AN ANTICANCER DRUG IN CLINICAL TRIALS

Vladimír Kryštof¹, Radek Jorda¹, Libor Havlíček²

¹Laboratory of Growth Regulators, Palacky University in Olomouc & Institute of Experimental Botany AS CR, Šlechtitelů 11, 78371 Olomouc, Czech Republic, vladimir.krystof@upol.cz

²Institute of Experimental Botany AS CR, Vídeňská 1083, 14220 Praha, Czech Republic

Insufficient therapeutic outcomes and serious side effects are common problems of current cancer therapies. An urgent need for new anticancer drugs has led to the development of molecules that can specifically inhibit cyclin-dependent kinases (CDKs). The deregulation of cell cycle components (including CDKs) in cancer cells has provided a rationale for the development of inhibitors as novel anticancer drugs that could act as CDK activity modulators, restore normal cell cycle regulation or induce cell death [1]. Roscovitine is a synthetic inhibitor of CDKs that undergoes evaluation in clinical trials, but its efficiency is not high. We have recently developed its bioisostere **7** with the pyrazolo[4,3-d]pyrimidine core [2]. Both compounds were evaluated in diverse biochemical assays and our results clearly demonstrate that a change in a position of a single nitrogen atom significantly improves CDK inhibitory properties of roscovitine.

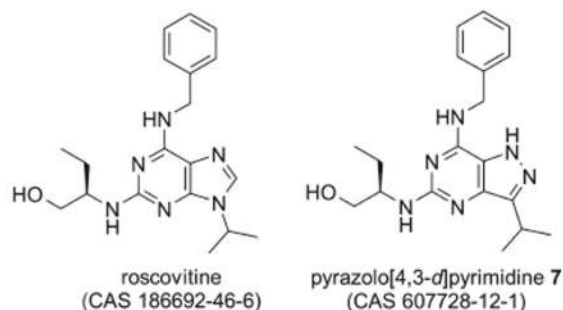


Fig. 1 Structure of roscovitine and its novel bioisostere.

This work was supported by grants GACR204/08/511 and MSM6198959216.

[1] Kryštof V.; Uldrijan S.: *Curr. Drug Targets* 11, 291 (2010).

[2] Jorda R.; Havlíček L.; McNae I.W.; Walkinshaw M.D.; Voller J.; Sturc A.; Navrátilová J.; Kuzma M.; Mistrik M.; Bártek J.; Strnad M.; Krystof V.: *J. Med. Chem.* 54, 2980 (2011).

3Po43

HYDROGÉLY NA BÁZE 2-OXAZOLÍNŮV

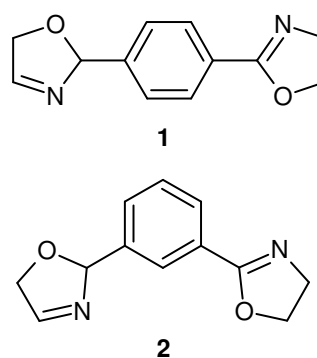
Jozef Lustoň¹, Juraj Kronek¹, Angela Kleinová¹, Marcel Mikulec¹, Veronika Mártonová^{1,2}

¹Ústav polymérov, Slovenská akadémia vied, Centrum excelentnosti GLYCOMED, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, Slovensko, upollust@savba.sk

²Slovenská technická univerzita, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovensko

2-Oxazolíny svojou variabilitnosťou zahŕňajú široký okruh produktov v oblasti organickej, makromolekulovej a materiálnej chémie [1]. Jednou z ich vlastností je hydrofilnosť derivátov obsahujúcich krátke alkylové reťazce v polohe 2. Na druhej strane, hydrofóbné vlastnosti vykazujú deriváty obsahujúce dlšie alkylové skupiny alebo aromatický kruh. Vhodnou kombináciou oboch typov zlúčenín možno dosiahnuť amfifilné vlastnosti. Špeciálnym typom amfifilných zlúčenín sú termosenzitívne materiály, ktorých polarita sa mení s teplotou.

Tieto vlastnosti sa dajú s výhodou využiť pri príprave termosenzitívnych hydrogélův, kde schopnosť zadržiavania vody sa mení so zložením hydrogélův a teplotou prostredia. Na tento účel sa využila kationová polymerizácia 2-etyl-2-oxazolínu, kde sa okrem monofunkčného a hydrofilného 2-etyl-2-oxazolínu použili ako sieťovacie činidlá hydrofóbné aromatické bis(2-oxazolíny) (Obr. 1).



Obr. 1. Štruktúra sieťovacích činidiel.

Dôležitou črtou pripravených amfifilných gélov je schopnosť napučievania v širokom spektre rozpúšťadiel, od vody až po uhlovodíky. Vo vode vykazujú vlastnosti hydrogélův, pričom sú schopné dosiahnuť stupeň napučania až 700 % v závislosti od hustoty siete. Naproti tomu,

napučiavanie získaných gélov dosiahlo stupeň napučania v chloroforme až 1000 %.

Autori d'akujú Grantovej agentúre MŠ a SAV VEGA za finančnú podporu projektu č. 2/0157/09 a Agentúre na podporu výskumu a vývoja v rámci projektu APVV-00362-10.

[1] J. Kronek, J. Lustoň, F. Bohme, Chem. Listy, 92, 484-495 (1998)

3Po44

POUŽITÍ IMOBILIZOVANÉHO PYRIDINIUM NITRÁTU JAKO KATALYZÁTORU PRO ŠTĚPENÍ β -PINENOXIDU NA PERILLOVÝ ALKOHOL

Ivana Luštická¹, Lucie Abelová¹, Eliška Vyskočilová-Leitmannová¹ a Libor Červený¹

¹Ústav chemické technologie, Fakulta chemické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 16628 Praha 6; Česká republika, e-mail: ivana.lusticka@vscht.cz

Perillový alkohol je velice žádanou látkou v mnoha průmyslových odvětvích. Výchozí látkou pro jeho přípravu může být β -pinenoxid [1]. Tato práce se zabývá syntézou výše zmíněného alkoholu katalytickým štěpením β -pinenoxidu pomocí heterogenizovaných amonium nitrátů.

Pyridinium nitrát, použitý jako katalyzátor, byl připraven reakcí pyridinu s kyselinou dusičnou s výtěžkem 95 % a následně imobilizován na pevné nosiče různého typu. Byl sledován vliv teploty, rozpouštědla, a typu použitého nosiče na množství imobilizovaného pyridinium nitrátu.

Vlastní reakce probíhala za podmínek již dříve stanovených pro homogenně katalyzované štěpení β -pinenoxidu, tj. v N,N-dimethylformamidu jako rozpouštědle při 70 °C v přítomnosti kyseliny dusičné.

U reakcí katalyzovaných pyridinium nitrátem na sílice a na montmorillonitu bylo dosaženo lepších výsledků než při reakci prováděné za stejných podmínek v homogenním uspořádání. Při použití heterogenizovaného pyridinium nitrátu bylo dosaženo 68 % selektivity perillového alkoholu při totální konverzi β -pinenoxidu. V homogenním uspořádání reakce bylo dosaženo pouze 58 % selektivity.

Autoři děkují IGA Praha za finanční podporu z grantu A1-FCHT-2011-06 a A1-FCHT-2011-010. Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č.21/2011). Dále děkují Grantové Agentuře České republiky (203/08 H032).

[1] Corma A., Renz M., Susarte M.: Top Catal 52 (2009) 1182

3Po45

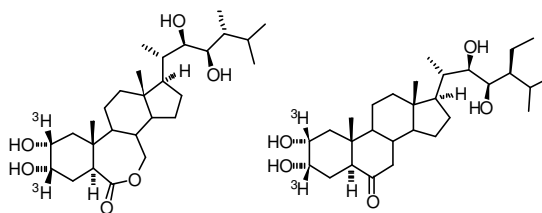
ZNAČENÍ STEROIDNÍHO SKELETU ISOTOPY VODÍKU

Aleš Marek, Mahadeo R. Patil, Tomáš Elbert

ÚOCHB AV ČR, v.v.i., Flemingovo nám. 2, Praha 6, 16610, marek@uochb.cas.cz

Brassinosteroidy jsou růstové hormony rostlin, které jsou nezbytné při růstu, vývoji a dělení buněk. Nedávný objev protinádorové aktivity brassinosteroidů¹ na lidské nádorové buňky vyžaduje při studiu jejich mechanismu účinku na molekulární úrovni značení radioisotopy. Isotop vodíku tritium je jednoznačně nejvhodnějším zářičem pro zavedení do molekuly jak vzhledem ke své dostatečné specifické aktivitě tak minimálnímu ovlivnění výchozí struktury.

Pro zavedení tritia bylo využito vicinálních diolových skupin, typických pro všechny brassinosteroidy. Parciální oxidací byly připraveny α -hydroxyketony, u kterých byla zkoumána příprava odpovídajících enolů² a jejich následná katalytická redukce beznosičovým plynem tritiem (modelově deuteriem) poskytující požadovanou biologicky aktivní sloučeninu značenou tritiem ve stabilních polohách. Studium vazby 24-[³H]epibrassinolidu a 28-[³H]homocasteronu (Schéma 1) na lidské estrogenové Er-alfa a Er-beta receptory povede k objasnění jejich protinádorové aktivity.



Obr. 1

Tato práce je podporována grantem IAA400550801 Grantové agentury Akademie věd ČR a je součástí výzkumného záměru Ústavu organické chemie a biochemie (Z40550506).

[1] Malíková J., Swaczynová J., Kolář Z., Strnad M.: Phytochemistry 69, 418-426, (2008).

[2] Marek A., Klepetářová B., Elbert T.: Collect. Czech. Chem. Commun. 76, 5, 443-456, (2011).

3Po46**DEVELOPMENT OF NOVEL QUATERNARY DETERGENTS AS PART OF DECONTAMINATION AND DISINFECTION MEANS**

J. Marek^{1,3,5}, J. Korabecny², K. Musilek¹, J. Cabal¹, K. Kuca³

¹ Department of Toxicology, Faculty of Military Health Sciences, University of Defense, Hradec Kralove, Czech Republic

² Department of Medicinal Chemistry and Drug Control, Faculty of Pharmacy, Charles University, Czech Republic

³ Department of Epidemiology, Faculty of Military Health Sciences, University of Defense, Hradec Kralove, Czech Republic

⁴ Centre of Advanced Studies, Faculty of Military Health Sciences, University of Defense, Hradec Kralove, Czech Republic (kucakam@pmfk.cz)

⁵ VAKOS XT, Prag, Czech Republic (www.vakosxt.cz) marekjanmgr@seznam.cz

The cationic detergents are well-known widespread group of compounds. They are used in many cases in pharmaceutical, chemical or food industry. We have focus our attention also on usage in military sector. Chemical and biological warfare agents are considered to be threat. Their misuse by terrorists is well discussed and due to this, many institutes throughout the world are interested in development of novel countermeasures against them. At our department, we are interested in development on novel antidotes against nerve agents and development of novel detergents which should be used as part of the decontamination and disinfection mixtures. Nowadays, we have prepared several series of novel quaternary detergents derived from benzalkonium salts. Instead of benzyl group, we have used pyridinium ring with different substituents. These compounds are currently tested for their decontamination and disinfection potency.

The support of Grant. No. OVUOFVZ200803 is gratefully acknowledged.

- [1] KUČA, K., MAREK, J., STODŮLKA, P., MUSÍLEK, K., HANUSOVÁ, P., HRABINOVÁ, M., JUN, D. Preparation of Benzalkonium Salts Differing in the Length of a Side Alkyl Chain. *Molecules*, 2007, vol. 12, č. 12, s. 2341-2347. (IF=0,940)
- [2] MAREK, J.; STODULKA, P.; CABAL, J.; SOUKUP, O.; POHANKA, M.; KORABECNY, J.; KUCA, K.; Preparation of the pyridinium salts differing in the length of the side alkylating chain; *Molecules*; 2010, vol. 15, s. 1967-1972. (IF=1,608)
- [3] TIWARI S., GHOSH K., MAREK J., KUCA K.:

Spectrophotometric determination of the acidity constants of some oxime based α -nucleophiles. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*. 2010, vol. 55 (3), s 1153-1157.

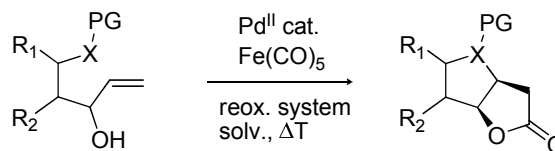
3Po47**PD^{II} CATALYZED LIQUID-PHASE OXYCARBONYLATION OF UNSATURATED POLYOLS AND AMINOALCOHOLS**

Martin Markovič, Matej Babjak, Tibor Gracza

Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia

E-mail: martin.markovic@stuba.sk, matej.babjak@stuba.sk

Palladium (II)-catalysed carbonylation of unsaturated polyols [1] and aminopolyols [2] represents a powerful synthetic tool due to its predictable stereocontrol and the synthetic availability of starting materials. Many syntheses of natural products and chiral building blocks, published during the last two decades, clearly demonstrate its advantages [3]. Nevertheless, the method required the presence of gaseous carbon monoxide, while our new conditions use iron(0) pentacarbonyl as an *in-situ* donor of carbon monoxide.



These new conditions provide similar or better yields and shorten the reaction times. Several examples and comparison with the classical conditions will be discussed.

This work has been supported by Grant Agency for Science (Slovak Republic) VEGA No. 1/0236/09 1/0115/10 and EU Structural Funds (ITMS 26240120001 and 26240120025).

- [1] M. F. Semmelhack, Ch. Bodurow, *J. Am. Chem. Soc.* **1984**, 106, 1496-1498; Y. Tamaru, T. Kobayashi, S.-I. Kawamura, H. Ochiai, Z.-I. Yoshida, *Tetrahedron Lett.* **1985**, 26, 4479-4482; Y. Tamaru, M. Hojo, Z.-I. Yoshida, *J. Org. Chem.* **1988**, 53, 5731-5741; T. Gracza, T. Hasenoehrl, U. Stahl, V. Jäger, *Synthesis* **1991**, 1108-1118
- [2] Y. Tamaru, M. Kimura, *Synlett* **1997**, 749-757; W. Hümmer, E. Dubois, T. Gracza, V. Jäger, *Synthesis* **1997**, 634-642.
- [3] T. Gracza, V. Jäger, *Synthesis* **1994**, 1359-1368; G. C. Paddon-Jones, Ch. J. Moore, D. J. Brecknell, W. A. Konig, W. Kitching, *Tetrahedron Lett.* **1997**,

38, 3479-3482; J. Boukouvalas, G. Fortier, I.-I. Radu, *J. Org. Chem.* **1998**, *63*, 916-917; D. J. Dixon, S. V. Ley, T. Gracza, P. Szolcsányi, *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 1* **1999**, *8*, 839-842; M. F. Semmelhack, P. Shanmugan, *Tetrahedron Lett.* **2000**, *41*, 3567-3572; M. Babjak, P. Kapitán, T. Gracza, *Tetrahedron Lett.* **2002**, *43*, 6983-6986; P. Szolcsányi, T. Gracza, I. Špánik, *Tetrahedron Lett.* **2008**, *49*, 1357-1360.

3Po48 MIGRACE ZMĚKČOVADEL Z POLYVINYLCHLORIDU

Hana Minaříková¹, Renáta Slavětínská¹, Libor Mastný¹, Radka Kalousková¹

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

Jednou z aplikačních oblastí měkčeného PVC je obalový průmysl. Přítomnost změkčovadel v potravinářských obalech (ale i obalech určených k uchování krevních přípravků a infuzních roztoků ve zdravotnictví) je řadu let předmětem kontroverzních diskuzí, neboť změkčovadla se mohou uvolňovat z PVC a dostat se do přímého kontaktu s potravinou (popř. s pacientem). Uvolňování je důsledkem migrace změkčovadla v polymerní matici, přičemž míru migrace ovlivňuje typ polymeru, jeho molekulová hmotnost, kompatibilita polymeru se změkčovadlem a samotné vlastnosti změkčovadla (tj. struktura a molární hmotnost), ale i způsob skladování výrobku nebo postup zpracování polymeru. Důsledkem jsou změny barvy a změny fyzikálních a mechanických vlastností měkčeného PVC. Při hodnocení migrace změkčovadel z plastů určených k balení potravin se vychází ze sledování hmotnostního úbytku měkčeného plastu v simulantu potravin, mezi které patří ethanol, kyselina octová, poly(2,6-difenyl-1,4-fenyleneoxid) s určitou velikostí částic a pórů a rostlinný olej o předepsaném rozložení mastných kyselin.

V příspěvku byly testovány stabilizované směsi PVC měkčené různými typy nízkomolekulárních změkčovadel, které se lišily chemickou strukturou, toxicitou a ekologickou přijatelností. Sledován byl vliv konzumního olivového oleje při laboratorní a zvýšené teplotě na stálost změkčovadel ve směsích ve formě fólií. Část fólií byla před louhováním vystavena umělému povětrnostnímu stárnutí. Vedle hmotnostního úbytku byly sledovány i změny teplot skelného přechodu, barevné změny a změny tepelné stability louhovaných i exponovaných fólií. Z hlediska výše uvedených parametrů byly

nejlepší výsledky zaznamenány u směsín měkčených ftaláty.

Práce vznikla v rámci projektu VZ MŠM 6046137302

3Po49 BICYCLIC ISOXAZOLIDINES AS BUILDING BLOCKS FOR THE PREPARATION OF THE BICYCLIC ISOXAZOLIDINYL NUCLEOSIDES

Michal Medvecký¹, Ľubor Fišera¹, Ján Moncol²

¹Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry, Slovak University of Technology, 812 37 Bratislava, Slovak Republic, mmedvecky@gmail.com

²Institute of Inorganic Chemistry, Technology and Materials, Slovak University of Technology, 812 37 Bratislava, Slovak Republic

The 1,3-dipolar cycloaddition of the chiral cyclic D-talo nitrono with vinyl acetate afforded two bicyclic isoxazolidinyl diastereoisomers in a ratio 82:18 with preference for syn-trans isomer **1** (Fig. 1). The absolute configuration of the major isomer **1** was determined by X-ray analysis. This cycloadduct **1** was employed as potential building block for the preparation of the polyhydroxylated pyrrolidines [1]. Moreover the isoxazolidinyl derivate **1** has been also used for the synthesis of the bicyclic isoxazolidinyl nucleosides [2].

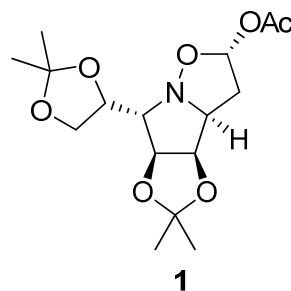


Fig. 1 Major isomer **1**

[1] Liautard V., Christina E. A., Desvergnès V., Martin O. R.: *J. Org. Chem.*, *71*, 7337 (2006)

[2] Hýrošová E., Medvecký M., Fišera Ľ., Hametner C., Fröhlich J., Marchetti M., Allmaier G.: *Tetrahedron*, *64*, 3111 (2008)

3Po50

PRÍPRAVA A KATIÓNOVÁ POLYMERIZÁCIA 4,5- DIHYDROOXAZOLOV S NENASÝTENOU VÄZBOU

Marcel Mikulec¹, Juraj Kronek¹, Jozef Lustoň¹,
Agnieszka Kowalczyk²

¹Ústav Polymérov Slovenskej Akadémie Vied, Centrum
Excelentnosti, Dúbravská cesta 9, 845 41, Bratislava
45

²Centrum polymérnych a uhlíkových materiálov,
Poľská akadémia vied, ul. Sowinskiego 5, Gliwice,
Poľsko

2-Oxazolínny obsahujúce nenasýtenú väzbu patria do skupiny bifunkčných zlúčenín poskytujúcich dva rôzne typy polymerizačných reakcií. Prvým typom sú „živé“ katiónové polymerizácie 2-oxazolínového kruhu [1]. Výsledkom takéhoto typu polymerizácie sú poly(N-acyletylénimíny) obsahujúce nenasýtenú väzbu v reťazci. Druhým typom reakcií sú radikálové polymerizačné reakcie uskutočňujúce sa cez nenasýtenú väzbu, pričom v zlúčenine zostáva zachovaný 2-oxazolínový skelet. Oba typy polymérov reprezentujú inteligentné polymérne materiály, ktoré môžu mať potenciálne využitie v biomedicínskych aplikáciách.

Boli pripravené tri monoméry obsahujúce 2-oxazolínový kruh a dvojitú väzbu: 2-izopropenyl-4,5-dihydrooxazol (I), 2-(2-fenyletenyl)-4,5-dihydrooxazol (II) a 2-[2-(4-metoxifenyl)etenyl]-4,5-dihydrooxazol (III). Pripravené monoméry sa využili na prípravu fotosenzitívnych a termosenzitívnych polymérov oboma katiónovou polymerizáciou. Pripravené polyméry sa charakterizovali z hľadiska štruktúry, termosenzitívnych a fotosenzitívnych vlastností.

Autori ďakujú Grantovej agentúre Ministerstva školstva a SAV VEGA za finančnú podporu projektu č. 2/0157/09 a Agentúre na podporu výskumu a vývoja APVV za možnosť mobility v rámci projektu APVV-SK-PL-0029-09.

[1] Aoi K., Okada M.: Prog. Polym. Sci. 21, 151-208 (1996).

[2] Adams N., Schubert U. S.: Adv. Drug Deliv. Rev. 59, 1504–1520 (2007)

3Po51

ŠTÚDIUM POVRCHU POLYMÉRNÝCH MIKROKAPSÚL NA ENKAPSULÁCIU PANKREATICKÝCH OSTROVČEKOV V LIEČBE CUKROVKY TYPU I

Dušana Mocinecová¹, Dušan Chorvát Jr.², Igor
Lacík^{1*}

¹Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 845 41
Bratislava, dusana.mocinecova@savba.sk

²Medzinárodné Laserové Centrum, Ilkovičova 3, 812
19 Bratislava

Cukrovka je choroba glukózového metabolizmu charakterizovaná hyperglykémiou, ako následok stárnutia populácie, obezity, zníženej telesnej aktivity, stresu a iných faktorov[1]. Pri cukrovke typu I pankreas diabetického pacienta neprodukuje inzulín, glukóza nie je schopná vstupovať do buniek a premieňať sa na energiu. Pri cukrovke typu II telo neprodukuje dostatočné množstvo inzulínu, alebo nie je schopné správne ho využívať. Jedným z nádejných spôsobov liečby cukrovky typu I je transplantácia pankreatických buniek enkapsulovaných v polymérnej membráne. Tento spôsob sa zdá byť vhodný na dlhodobé zabezpečenie normoglykémie bez imunosupresívnej liečby.

Vlastnosti povrchu polymérnych mikrokapsúl na enkapsuláciu pankreatických buniek, ako chémia, náboj, topografia a prítomnosť defektov sa javia ako kľúčové vo vzťahu k biokompatibilite mikrokapsúl *in vivo* podmienkach[2]. Tieto charakteristiky je možné študovať analytickými metódami ako XPS, FTIR, zeta potenciál, AFM, CLSM a iné.

Príspevok sa venuje štúdiu vlastností povrchu tzv. „PMCG mikrokapsúl“ [3], ktoré sú jedným z kandidátov na liečbu cukrovky typu I. PMCG mikrokapsule predstavujú viaczložkový systém tvorený polyaniónovou zložkou (alginát sodný, sulfát celulózy) a polykatiónovou zložkou (polymetylén-ko-guanidín hydrochlorid). Príspevok sa venuje štúdiu chémie povrchu mikrokapsúl pomocou ATR a micro-FTIR spektroskopie, tvorby mikrokapsúl a vzniku povrchových defektov, korelovanou so štúdiom topografie pomocou AFM. Spomenuté vlastnosti boli študované v závislosti od podmienok prípravy.

Príspevok bol vytvorený realizáciou projektu Centrum pre Materiály, vrstvy a systémy pre aplikácie a chemické procesy v extrémnych podmienkach - Etapa II na základe podpory operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja, medzinárodným programom pre funkčnú liečbu cukrovky The Chicago Diabetes

Project. Táto práca bola tiež podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APVV-0486-10.

- [1] Lacík I. *Aust.J.Chem.* **2006**, 59, 508-524.
 [2] Hallé J. P., de Vos P., Rosenberg L. The bioartificial pancreas and other biohybrid therapies, *Research Signpost*, **2009**, 97-136.
 [3] Lacík I., Briššová M., Anilkumar A. V., Powers A. C., Wang T *J.Biomed.Mater.Res.* **1998**, 39, 52-60.

3Po52

SYNTHESIS OF NEW POTENTIAL CONSTRAINED CERAMIDE ANALOGS

Daniela Moravčíková, Dušan Berkeš

Department of Organic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava

Sphingolipids - ubiquitous components of the eukaryotic cell membranes, emerged as active participants in the regulation of key biologic functions, including cell growth, differentiation, transformation, and apoptosis.[1] To date, only a few conformationally constrained sphingolipid analogs have been characterized. In this report are described the synthesis of new eventual constrained ceramide analogs which are closer to the real conformational and electronic properties of ceramide on the basis of pyrrolidine ring. These synthetic pyrrolidine-derivative can be regarded as a conformational restricted analog of 1-deoxy-5-hydroxysphinganine, which showed cytotoxic effects against HT-29 cells. [2] Extrapolation of this concept, our research group developed the synthesis of polysubstituted oxoproline involving the highly stereoselective intramolecular Michael addition as a key step [3]. In this contribution are described the application of synthesized oxoproline for the preparation of enantiomerically pure pyrrolidinols.

Original structure:

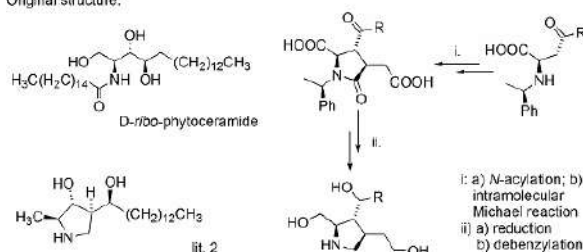


Fig. 1 Synthetic route to rigid ceramide analogs

Acknowledgements: Financial support by the Slovak Grant Agency No. 1/0441/11 is gratefully acknowledged.

- [1] T. Kolter, K. Sandhoff: *BBA*, 1758, 2057-2079 (2006)
 [2] A.M. Dougherty, A.H. Merrill et.al: *Org. Lett.* 8,

649-652, (2006)

- [3] D. Moravčíková, *Diploma work*, STU Bratislava, (2008)

3Po53

PRÍPRAVA A VLASTNOSTI KOMPOZITOV RECYKLOVANÉHO POLYETYLÉNU S DREVNOU MÚČKOU Z DATĽOVEJ PALMY

Zuzana Nógellová¹, Igor Krupa¹, Mariam A. Al-Maadeed², Nabil Kassem Madi²

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

zuzana.nogellova@savba.sk

²*MTU, Qatar University, P.O.BOX 2713, Doha, QATAR*

Polymérne kompozity plnené prírodnými vláknami sú zaujímavými materiálmi pre ich široké možnosti použitia, najmä v automobilovom priemysle, kde sú náhradou sklenených alebo uhlíkových vlákien. Prírodné vlákna nielen zlepšujú fyzikálne vlastnosti materiálu, ako mechanické vlastnosti, absorpciu hluku, znižujú oder spracovateľských strojov, ale ďalšou výhodou je zníženie ceny materiálu vďaka hojnému výskytu týchto vlákien v prírode. Naviac, použitie prírodných vlákien je ekologickejšie a bezpečnejšie než použitie sklenených alebo uhlíkových vlákien. Ďalším dôležitým prínosom tejto práce je, že ako matrica pre prípravu kompozitných materiálov bol použitý recyklovaný nízko hustotný polyetylén.

V tejto práci prezentujeme výsledky fyzikálnych vlastností recyklovaného nízko hustotného polyetylénu plneného drevnou múčkou z datľovej palmy v rôznych koncentráciách. Na zvýšenie kompatibility medzi polymérom a organickým plnivom sme použili sieťovanie organickým peroxidom. Tento postup vedie k zlepšeniu mechanických vlastností kompozitov.

Tento výskum bol podporený Vedeckou Grantovou Agentúrou Ministerstva školstva, vedy, výskumu a športu Slovenskej republiky a Slovenskej akadémie vied (projekt č.2/0063/09) a Grantom QSTP Qatarskej univerzity (EXQUQSTP 0906).

3Po54 STEROIDNÍ DERIVÁTY-PŘÍPRAVA A FYZIKÁLNÍ VLASTNOSTI

Zdena Nováková¹, Erkki Kolehmainen², Pavel Drašar¹

¹VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6

²University of Jyväskylä, Department of Chemistry, P.O.Box 35, FIN-40014 Finland,

zdena.novakova@vscht.cz

Naším cílem je příprava různých derivátů žlučových kyselin, které jsou přirozenou součástí živých organismů (vznikají během metabolismu cholesterolu) [1].

Při spojení s aromatickou sloučeninou, která je schopna díky volným elektronovým pářím komplexovat kovy, dochází k výhodné kombinaci z hlediska využití v analytické chemii.

Syntéza se odvíjí od výchozího 1,10-phenanthrolinu, který je oxidován, následně adicí vzniká dioxim, jehož redukcí dostaneme požadovaný diamín. Tento diamín je pro srovnání umístěn do různých pozic steroidní kyseliny přes amidovou vazbu. V pozici tři bylo pro spojení využito čtyřuhlíkatého můstku.

Při zjišťování fyzikálních vlastností bylo využito široké spektrum analytických metod, také jsme vyzkoušeli možnosti komplexace kovů.

Práce byla podpořena 2B06024 (SUPRAFYT), M200380901 (AS CR), CIMO scholarship a z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum MŠMT (Rozhodnutí č. 21/2011)

[1] Willemen H. M., Vermonden T., Marcelis A. T. M., Sudholter E. J. R.: Eur. J. Org. Chem. 2001, 12, 2329.

3Po55 REAKCIE 1- METOXYSPIROINDOL[3,5']TIAZOLÍN-1- IUMBROMIDU S GRIGNARDOVÝMI ČINIDLAMI

Peter Očenáš¹, Lucia Tomášová¹, Peter Kutschy¹, Ján Mojžiš², Martina Pilátová²

¹Univerzita P. J. Šafárika, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Katedra organickej chémie, Moyzesova 11, 040 01 Košice, peter.ocenas@gmail.com

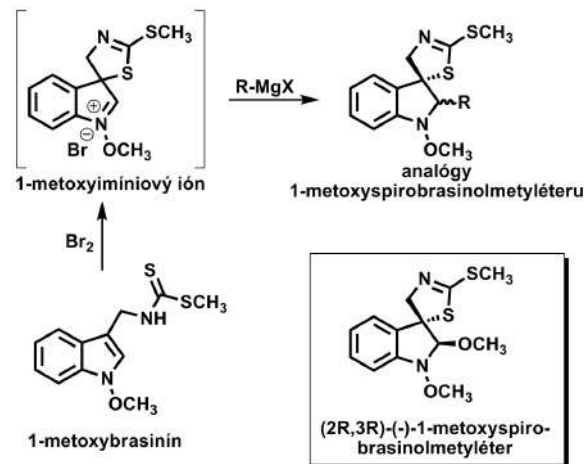
²Univerzita P. J. Šafárika, Lekárska fakulta, Ústav farmakológie, Trieda SNP 1, 040 11 Košice

Prírodné látky so svojimi biologickými vlastnosťami sú predmetom skúmania pri vývoji nových liečiv. Významnú skupinu prírodných látok so zaujímavými biologickými vlastnosťami tvoria indolové fytoalexíny, izolované z rastlín

čeľade Kapustovité (*Brassicaceae*). Tieto zlúčeniny boli izolované z hospodársky celosvetovo významných rastlín (brokolica, karfiol, kaleráb, kel, reďkovka, rôzne odrody kapusty alebo horčica). Indolové fytoalexíny vykazujú popri antimikróbnej aj chemopreventívnu a protinádorovú aktivitu [1, 2]. Dlhodobé štúdium syntézy indolových fytoalexínov a ich analógov nás viedlo k preštudovaniu syntézy 2-alkyl- a 2-arylanalógov 1-metoxyspirobrasinolmetyléru, u ktorých dochádza k náhrade C-O väzby prítomnej v prírodnej látke za novú C-C väzbu využitím Grignardových činidiel.

Základom pre vznik našich cieľových zlúčenín je tvorba imíniového iónu reakciou 1-metoxybrasinínu s Br₂, ktorý v nasledujúcom kroku reakciou s Grignardovým činidlom poskytuje *cis*- a *trans*-diastereoizomémerne produkty (Obr. 1).

Protinádorová aktivita syntetizovaných zlúčenín bola testovaná na bunkových líniiach leukémie (Jurkat, CEM), rakoviny prsníka (MDA, MCF7), rakoviny krčka maternice (HeLa) a rakoviny pľúc (A-549).



Obr. 1 Syntéza 2-alkyl- a 2-arylanalógov 1-metoxyspirobrasinolmetyléru

Táto práca bola podporovaná projektmi VEGA 1/0406/10, VVGS 13/2011/Ch.

[1] Pedras, M. S. C.; Zheng, Q.; Sarma-Mamillapalle, V. K.: Natural Product Communications **2007**, 2, 319.

[2] Kutschy P., Mezencev R.: Indole Phytoalexins from Brassicaceae: Synthesis and Anticancer Activity. In: Targets in Heterocyclic Systems – Chemistry and Properties. Attanasi O. A., Spinelli D., Eds., Italian Society of Chemistry, Urbino, Italy, 2009. **2008**, 12, 120.

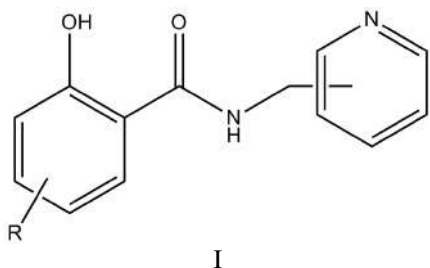
3Po56

**STUDIUM INTRAMOLEKULÁRNÍCH
VODÍKOVÝCH MŮSTKŮ U
ANTIMYKOBAKTERIÁLNĚ AKTIVNÍCH
SALICYLAMIDŮ POMOCÍ
SPEKTRÁLNÍCH A VÝPOČETNÍCH
METOD**

Karel Palát¹, Eva Novotná¹, Karel Waissner¹

¹Farmaceutická fakulta Univerzity Karlovy,
Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, Česká
republika, palat@faf.cuni.cz

U 19 N-(2-pyridylmethyl)salicylamidů a N-(3-pyridylmethyl)salicylamidů I byly vytvořeny počítačové modely na základě kvantově chemických výpočtů na B3LYP/6-311+G(d,p) úrovni. Vypočtené konformace ukazovaly na stabilizaci molekul vodíkovými vazbami mezi salicylovým hydroxidem a karbonylovým kyslíkem. Proto byly studovány tyto interakce ve zředěných roztocích v chloridu uhličitém za pomoci infračervené spektroskopie[1]. Naměřené hodnoty vlnočtů valenční vibrace hydroxylové skupiny potvrzují přítomnost intramolekulárních vodíkových můstků. Byly též úspěšně nalezeny korelace mezi naměřeným vlnočtem vibrací této skupiny a parametry získanými z počítačových modelů molekul.



Práce byla podpořena výzkumným záměrem
MSM 0021620822 a grantem IGA NS10367-3.

[1] Tichý M., Advan. Org. Chem. 5, 115 (1965).

3Po57

**ALKOXYPHENYLMIDAZOLINES/IMIDA
ZOLES AS CHOLINESTERASES
INHIBITORS – SYNTHESIS AND
DETERMINATION OF INDEX pI₅₀**

Patrik Pařík¹, Šárka Štěpánková²

¹Institute of Organic Chemistry and Technology,
Faculty of Chemical Technology, University of
Pardubice. Studentská 573, 532 10 Pardubice, Czech
Republic. Patrik.Parik@upce.cz

²Department of Biological and Biochemical Sciences,
Faculty of Chemical Technology, University of
Pardubice. Studentská 573, 532 10 Pardubice, Czech
Republic.

The serie of 2-(2-alkoxyphenyl)-1H-imidazolines was prepared by reaction of methyl 2-hydroxybenzoate with ethane-1,2-diamine followed by alkylation with alkylhalogenides. Dehydrogenation on palladium in toluene was used for transformation of prepared imidazolines to corresponding imidazoles. Following previously prepared derivatives (in which alkyl is C1-C4, and benzyl) six new 2-(2-alkoxyphenyl)-1H-imidazolines and six new 2-(2-alkoxyphenyl)-1H-imidazoles were prepared (alkyl is pentyl, isopentyl, pentan-2-yl, pentan-3-yl, hexyl, heptyl). [1]

Mentioned derivatives were tested *in vitro* as potential inhibitors of hydrolysis of acetylcholine using enzyme preparation of acetylcholinesterase from electric eel and butyrylcholinesterase from horse serum. The excess of the enzymes in the brain cells causes the lack of neurotransmitter acetylcholine and this fact is therefore considered as possible reason of Alzheimer disease. Spectrophotometric Ellman method was used for determination of index pI₅₀. [2] Tested derivatives acts as effective inhibitors of cholinesterases.

The authors thank the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic for financial support (project MSM0021627501 and MSM 0021627502).

[1] Pařík P., Šenauerová S., Lišková V., Handlř K., Ludwig M.: *J. Heterocyclic Chem.* **2006**, 43, 835-841.

[2] Zdražilová P., Štěpánková Š., Komers K., Ventura K., Čegan A.: *Z. Naturforsch.* **2004**, 59c, 293-296.

3Po58

CÍLENÁ SYNTÉZA DERIVÁTŮ
PŘESMYKU ESTERŮ SALICYLANILIDŮKarel Pauk¹, Aleš Imramovský¹, Jiří Hanusek¹,
Vladimír Pejchal¹¹Ústav organické chemie a technologie, Fakulta
chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, 532 10
Pardubice, Karel.Pauk@seznam.cz

Deriváty 2-Hydroxy-*N*-[1-(2-hydroxyfenyl-
amino)-1 oxoalkan-2- yl]benzamidů **III** jsou
originální organické látky. Tyto sloučeniny
mohou sloužit jako potenciální antimikrobiální
léčiva proti kmenům tuberkulózy, jako je
Mycobacterium tuberculosis (*M. tbc*), *M. avium*
nebo *M. kansasii*.

Syntéza těchto látek spočívala v esterifikaci
substituovaných salicylanilidů **I**, následně
deprotekcí a přesmyku, kdy vznikal zmíněný
hydroxy-*N*-(fenylamino)-oxoalkylbenzamid
(diamid) **III**. (Schéma 1).²

Tento přesmyk není ještě zcela objasněn, ale je
podroben dalšímu zkoumání. Pro účely testování
biologické aktivity diamidů a jejich derivátů byla
zvolena rozdílná, výhodnější syntetická cesta.
Výchozí anilín **IV** reaguje s *N*-chráněnou
aminokyselinou, která po deprotekcí reaguje se
substituovanou kyselinou acetyl salicylovou. Po
hydrolyze vzniká hydroxy-*N*-(fenylamino)-
oxoalkylbenzamid (diamid) **VII** (Schéma 2).
Výhoda této cesty je, že se v reakční sekvenci
získá jak diamid **VII**, tak i *O*-acetyl derivát **VI**,
který jinak připravit nelze, jelikož přímá
acetylace diamidu **III** resp. **VII** je nemožná.

Připravená prezentace obsahuje i tabulku a
syntézu nových derivátů salicylanilidů.

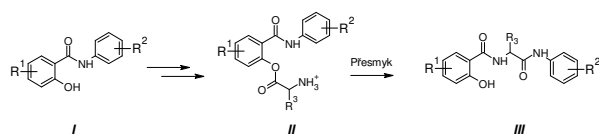


Schéma 1: Syntéza diamidu

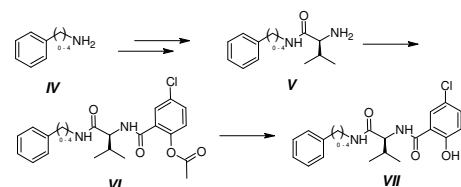


Schéma 2: Syntéza derivátů diamidu

Autoři děkují za finanční podporu Ministerstva
školsství, mládeže a tělovýchovy České Republiky
(Projekt SGFChT 02 UPa).

[1] J. Vinšová, A. Imramovský, M. Krátký, J. M.
Férriz, K. Palát, A. Lyčka, A. Růžička:
Tetrahedron Lett., 51, (1), 23-26, (2010).

[2] Imramovský A., Vinšová J., Férriz J. M., Kuneš J.,
Pour M., Doležal M.: Tetrahedron Lett. 47, 5007-
5010 (2006).

3Po59

1-[(1*R*)-1-(6-FLUOR-1,3-BENZTHIAZOL-2-
YL)ETHYL]-3-SUBSTITUOVANÉ FENYL
MOČOVINY JAKO INHIBITORY
ACETYLCHOLINESTERÁZYVladimír Pejchal¹, Šárka Štěpánková²

¹Ústav organické chemie a technologie, Fakulta
chemicko-technologická, Univerzita Pardubice,
Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká Republika
²Katedra biologie a biochemických věd, Fakulta
chemicko-technologická, Univerzita Pardubice,
Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká Republika

Benzthiazoly jsou popsanou skupinou sloučenin s
širokou oblastí biologických aktivit, a to
především antibakteriálních a fungicidních,
virucidních i protinádorových [1,2].
Benzthiazolový kruh je také přítomný v řadě
přírodních látek rozmanité biologické aktivity [3].
Benzthiazoly mohou sloužit jako jedinečné
výchozí komponenty pro vývoj experimentální
léků. Byla připravena série nových opticky
aktivních látek. 1-[(1*R*)-1-(6-fluor-1,3-
benzthiazol-2-yl)ethyl]-3-substituované phenyl
močoviny byly syntetizovány reakcí *R*-1-(6-
fluorbenzthiazol-2-yl)ethanaminu se
substituovanými fenyl isokyanáty. Připravené
sloučeniny byly charakterizovány ¹H, ¹³C and ¹⁹F
NMR spektrometrií a elementární analýzou.
Optická aktivita byla charakterizována měřením
optické otáčivosti. Z biologických aktivit byla
studována inhibice vůči acetylcholinesteráze
(AChE) a butyrylcholinesteráze (BChE).

U všech připravených močoviny byly stanoveny
velmi dobré inhibiční vlastnosti. Tyto látky by
mohly být potenciálně účinné při terapii
pozdních příznaků Alzheimerovy choroby. Byla u
nich prokázána silnější inhibice BChE než AChE.

Autoři děkují za finanční podporu Ministerstvu školství
mládeže a tělovýchovy České Republiky, projekt
MŠMT 0021627501.

[1] S. Bondock, W. Fadaly, M.A. Metwally, Eur. J.
Med. Chem. 45 (2010) 3692-3701.

[2] V. Sekar, P. Perumal, S. Gandimathi, S.
Jayaseelan, V. Rajesh, Asian J. Chem. 22 (2010)
5487-5492.

[3] C.J. Lion, C.S. Matthews, G. Wells, T.D.
Bradshaw, M.F.G. Stevens, A. D. Westwell,

Bioorg. Med. Chem. Lett. 16 (2006) 5005-5008.

3Po60

STABILIZERS BOUND COVALENTLY ON CHAINS OF MODEL POLYURETHANES: COLOR STABILITY

Jiří Podešva¹, Tereza Titěrová², Vladimír Špaček³, Luboš Prokůpek², Jana Kovářová¹

¹Institute of Macromolecular Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, v.v.i., Heyrovsky Sq. 2, 16200 Prague 6, podesva@imc.cas.cz

²University of Pardubice, Faculty of Chemical Technology, Institute of Chemistry and Technology of Macromolecular Materials, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Czech Republic

³SYNPO, S. K. Neumanna 1316, 53207 Pardubice, Czech Republic

By the influence of light, most plastics, including polyurethanes (PU), change their color which is undesirable for many applications. To reduce this phenomenon, various commercial light stabilizers, e.g. sterically hindered amines (HALS), are used, mostly in the form of a low-molar-mass additive. However, these substances may evaporate or are washed from the material. Much effort has therefore been exerted to join stabilizer molecules to polymer chains by covalent bonds (e.g. [1]) which increases the persistence of the stabilizing moieties in the polymer matrix.

Foils of two types of self-stabilized elastomeric polyurethanes were prepared from commercial isocyanate Desmodur L75 and either modified or unmodified short-chain, OH-telechelic, 1,2-rich polybutadiene. The modification consisted in the free-radical addition of derivatives of a phenolic antioxidant and a HALS-type stabilizer both bearing SH group to the pending vinyl groups of polybutadiene. Unmodified polybutadiene reacted with Desmodur in the presence of commercial Irganox 1076 and 2,2,6,6-tetramethylpiperidin-4-ol. Accelerated weathering experiments using the QUV panel were performed with these foils to determine the color change. The extent of undesirable color changes is reduced for both types, as compared to unstabilized polyurethane.

Authors wish to thank to the Grant Agency of the Ministry of Industry and Trade of the Czech Republic, the TIP program, project No. FR-TI 2/338.

[1] W. W. Y. Lau, J. Q. Pan, in: Desk Reference of Functional Polymers (Arshady, R. editor). Washington, D. C., American Chemical Society, 1997; Part 4, p. 621.

3Po61

SYNTHESIS OF 1,2,3-TRIAZOLO-LINKED OCTYL (1→6)- α -D-OLIGOMANNOSIDES AND THEIR EVALUATION IN MYCOBACTERIAL MANNOSYLTRANSFERASE ASSAY

Monika Poláková¹, Martina Beláňová², Katarína Mikušová², Erika Lattová³, Héléne Perreault³

¹Institute of Chemistry, Center for Glycomics, GLYCOMED, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, SK-845 38 Bratislava, Slovakia

²Department of Biochemistry, Comenius University, Faculty of Natural Sciences, Mlynská dolina, CH1, ŠK-842 15 Bratislava, Slovakia

³University of Manitoba, Department of Chemistry, 144 Dysart Road, Winnipeg, Manitoba R3T 2N2, Canada

monika.polakova@savba.sk

1,3-Dipolar cycloaddition reaction (“click” reaction) is a powerful mean for linking two units, one with azide and the other consisting of an alkyne function. The reaction is also widely used for linking a carbohydrate with another carbohydrate or noncarbohydrate unit.^[1]

The click reaction was applied in the synthesis of conjugates consisting of two or three mannose moieties, wherein each glycosidic linkage between mannose units is replaced by 1,2,3-triazole spacer, while a glycosidic linkage between the aglycone and the first sugar unit remained intact. These conjugates were screened in mycobacterial mannosyltransferase (ManT) assay. LC-MS analysis of the reaction products showed that these compounds with triazole linker between sugar moieties were tolerated by the enzyme, which elongated them by one or two sugar units with α -(1→6) linkage. The effectiveness of this transfer was reduced in comparison with that observed for the acceptor analogs containing a glycosidic linkage. Nevertheless, this is the first report on such unnatural compounds serving as substrates for mycobacterial ManT.^[2]

This work was supported by the APVV-51-046505, VEGA-2/0199/09 grants, and by European Commission under contract LSHP-CT-2005-018923 “NM4TB”.

[1] Meldal M., Tornøe Ch.W. *Chem. Rev.* **2008**, *108*, 2952–3015

[2] Poláková M., Beláňová M., Lattová E., Mikušová K., Perreault H. *Bioconjugate Chem.* **2011**, *22*, 289-298

3Po62**PŘÍPRAVA A REAKČNÍ SCHOPNOST 5-THIOFENYL-1,2,4-DITHIAZOL-3-ONU**Oleksandr Ponomarov¹, Jiří Hanusek¹¹Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Studentská 573, 532 10, Česká republika

Fosforotioatu oligonukleotidu jsou modifikovány nukleotidy u kterých atom kyslíku na fosforu je nahrazeny atomem síry. 1,2,4-dithiazoly jsou vhodný činidla pro syntezu fosforotioatu oligonukleotidu [1,2]. Je to kvůli tomu, že reakce sulfurizace v případě 1,2,4-dithiazolu velmi rychle a roztoky těchto látek jsou stabilní.

V rámci této práce byl připraven 5-thiofenyl-1,2,4-dithiazol-3-on. Příprava této látky se spocívá v tvorbě dithiazolového kruhu z chlorocarbonylsulfenylchloridu a fenyldithiokarbamatu.

Vychází fenyldithiokarbamat byl získán v důsledku addice sirovodíku na fenylothiokyanat v kyselém prostředí.

Kinetyka reakce sulfurizace byla zkoumana na modelní reakci z trifenylnfosfitem.

- [1] Hanusek J., Russel M. A., Laws A. P., Page M. I.: Tetrahedron Lett. 2007, 48, 417-419
 [2] Hanusek J., Russell M. A., Laws A. P., Jansa P., Atherton J. H., Fettes K., Page M. I.: Org. Biomol. Chem. 2007, 5, 478-484.

3Po63**KONSTANTY ACIDITY A MS CHARAKTERIZACE VYBRANÝCH 1-SUBSTITUOVANÝCH PIPERAZINŮ**

Markéta Procházková, Dana Němečková, Barbora Andělová, Josef Havel, Pavel Pazdera *

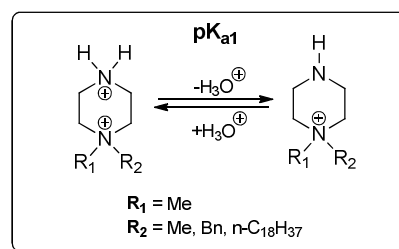
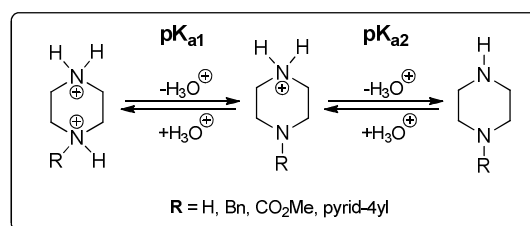
Centrum pro syntézu za udržitelných podmínek a jejich management, Ústav chemie, Masarykova univerzita, Kotlářská 2, 611 37 Brno
 marky.prochazkova@centrum.cz; pazdera@chemi.muni.cz

Piperazinový strukturální motiv nachází široké uplatnění v oblasti farmakologie. Tento farmakofor je obsažen v 71 z 1729 perorálně podávaných léčiv (stav k roku 2004)¹. Jedním z důvodů jeho širokého využití v oblasti farmakologie je fakt, že zlepšuje rozpustnost, tím usnadňuje perorální podání těchto léčiv a také napomáhá jejich průniku buněčnými membránami.

Pro studium biologických účinků a chemického chování² substituovaných piperazinů a jejich praktické aplikace v různých oblastech chemie je

důležitá znalost jejich pKa hodnot. V rámci této práce byly studovány konstanty acidity a MS charakterizace nových 1-substituovaných piperazinů a 1,1-disubstituovaných piperazin-1-iových solí. Konstanty acidity těchto látek byly stanoveny potenciometricky a konduktometricky ve vodném prostředí a nalezené hodnoty byly porovnány se známými hodnotami popsanych analogů.

Metodou MALDI-TOF byly provedeny MS charakterizace nových substituovaných piperazinů a piperaziniových solí a nalezeny jejich charakteristické fragmenty, které byly porovnány s daty dostupnými v literatuře.



Práce byla podpořena z prostředků Ministerstva průmyslu a obchodu ČR, projekt č. 2A-ITP1/090.

- [1] Vieth M. et al. : J. Med. Chem. 47, 224 (2004).
 [2] Khalili F., Henni A., East A. L. L.: J. Chem. Eng. Data, 54, 2914 (2009).

3Po64**SYNTÉZA A VLASTNOSTI CHIRÁLNÍCH 2,2-DIMETHYL-1,3-DIOXOLAN-4,5-DIKARBOHYDRAZIDŮ ALKYLOVANÝCH NA DUSÍKU**Oldřich Pytela¹, Jana Kousalová¹

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

Byly navrženy a experimentálně ověřeny dva možné postupy syntézy doposud nepopsaných chirálních C₂-symetrických alkylovaných dihydrazidů vinné kyseliny. Oběma postupy byly provedeny pokusy o syntézu 17 alkylovaných derivátů, z nichž pouze 7 bylo úspěšných. Oba postupy mají své výhody a nevýhody. První postup je založen reakcí (4R,5R)-dimethyl-2,2-dimethyl-1,3-dioxolan-4,5-dikarboxylátu

s příslušnými alkyldiazinami, druhý na alkylyaci (4*R*,5*R*)-2,2-dimethyl-1,3-dioxolan-4,5-dikarbohydrazidu příslušnými alkyldiazinami. Podmínkou prvního postupu je dostupnost potřebných alkyldiazin, resp. *N,N*-dialkyldiazinů. Problémem byla nedostatečná reaktivita některých diazinů, vznik řady vedlejších produktů, případně odstranění nezreagovaného substituovaného diazinu, použitého v nadbytku, z reakční směsi. Tímto postupem byly připraveny tři deriváty. Při druhém postupu založeném na alkylyaci (4*R*,5*R*)-2,2-dimethyl-1,3-dioxolan-4,5-dikarbohydrazidu byl problém zejména s reaktivitou příslušných alkyldiazinů, vznikem částečně alkylovaných diazinů a následně i izolací požadovaného produktu. Tímto postupem byly získány čtyři deriváty. Obecně se jako stěžejní problém ukázala izolace produktů, které jsou díky své struktuře velmi rozpustné jak v polárních rozpouštědlech, tak částečně až dobře (podle počtu a povahy substituentů) i v nepolárních rozpouštědlech. Vybrané produkty testovány jako potenciální chirální katalyzátory aldolizace a chirální ligandy v Henryho reakci. Přestože se připravené sloučeniny nevykázaly očekávané katalytické vlastnosti, je práce přínosem v oblasti syntézy a vlastností diazinů odvozených od vinné kyseliny.

Tato práce byla podpořena Grantovou agenturou České republiky, grant č. 203/08/0208.

3Po65 POLYMERS FROM RENEWABLE MONOMERS BASED ON BUTYROLACTONE DERIVATIVES

M. Sabolová,¹ M. Danko,² J. Mosnáček²

¹ Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, Slovakia, e-mail: milica.sabolova@savba.sk

² Polymer Institute, Centre of excellence GLYCOMED, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, Slovakia

The utilization of fossil fuels in the manufacture of plastics accounts for 7% of worldwide oil and gas. These resources will arguably be depleted within the next one hundred years, and the peak in global oil production as estimated by some will occur within the next few decades. Various products and materials coming from natural sources such as plants or animals are known for long time. At a present time, their importance is growing due to many reasons. Their advantage is

that they are renewable, environmentally friendly, biocompatible and biodegradable and they have some special physical and potentially also biomedical properties. Currently, there are only few commercial examples of plant derived plastics, mostly due to their relatively high cost vs. their petrochemical analogues. Therefore, they were used mainly only for special applications.

γ -Butyrolactone and its derivatives, such as α -methylene- γ -butyrolactone (MBL) or Angelica lactones, are compounds from renewable resources, which can be used as monomers for ring opening copolymerization with various lactones.¹ In addition unsaturated derivatives can be used also for preparation of polymers by radical polymerization.²

This contribution is the result of the project implementation: Centre for materials, layers and systems for applications and chemical processes under extreme conditions Stage II supported by the Research & Development Operational Programme funded by the ERDF. The authors also thank for the financial support of the Slovak Research and Development Agency through grant APVV-0109-10 and Grant Agency VEGA through grant 2/0074/10.

[1] Zhou J.W., Schmidt A.M., Ritter H.: *Macromolecules*, 43, 939 (2010).

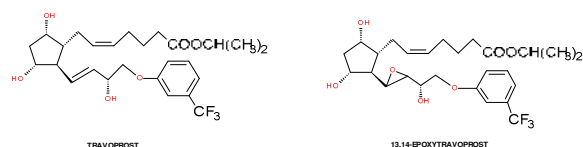
[2] Mosnáček J., Matyjaszewski K.: *Macromolecules*, 41, 5509 (2008).

3Po66 SYNTÉZA 13,14-EPOXYTRAVOPROSTU

Michal Sedlák¹, Ivan Veselý¹

¹Caymanpharma s.r.o., ul. Práce 657,277 11 Neratovice, ČR, michal.sedlak@caymanpharma.cz

Nečistotní profil travoprostu, účinné složky léku TRAVATAN® používaného k léčbě glaukomu, je definován v americkém lékopisu USP 32. Jednou ze specifikovaných nečistot je tzv. „Epoxide derivative“ se strukturou uvedenou na obr. 1. Tato nečistota zřejmě pochází z výrobního procesu originátora (firma Alcon, USA). Výrobní postup travoprostu ve firmě Cayman Pharma s.r.o., která je etablována jako významný producent prostaglandinových generik, je založen na syntéze prakticky vylučující vznik uvedené nečistoty. Pro úspěšnou registraci generického léčiva je nutno tento fakt jednoznačně prokázat. Navrhli jsme a provedli syntézu obou stereoisomerů 13,14-epoxytravoprostu a HPLC analýzou jsme prokázali jejich nepřítomnost v našem produktu.



Obr. 1 TRAVOPROST a 13,14-EPOXYTRAVOPROST

- [1] J.C. Sih a kol.: Prostaglandins Vol.15(No.3), 409 (1978).
 [2] R. A. Johnson a kol.: US 4,110,532 (1978).
 [3] Ch. Liljebris a kol.: J. Org. Chem. **1996**, 61, 4028.

3Po67 KOMPATIBILNOST SMĚSÍ CANDESARTANU CILEXETILU A CYKLODEXTRINU

Lenka Seilerová¹, Lukáš Krejčík², Bohumil Kratochvíl¹, Hana Brusová²

¹Ústav chemie pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, lenka.seilerova@gmail.com

²Zentiva k.s., U Kabelovny 130, 102 37 Praha 10

Pro formulaci léčivého přípravku jsou nezbytné informace o stabilitě jeho složek. Léčivý přípravek je tvořen účinnou látkou a pomocnými látkami (excipienty). Excipienty upravují jak vlastnosti aktivní látky, tak vlastnosti vznikajícího léčivého přípravku. Z toho důvodu se provádějí měření kompatibility různých směsí. Složkami takových směsí bývá účinná látka v kombinaci s různými excipienty.

Příspěvek se zabývá možnostmi měření kompatibility složek farmaceutických směsí. Konkrétně je rozebrána metodika měření kompatibility studií na přístroji Micro-DSC III (Setaram). V porovnání s ostatními metodami, které se pro tato stanovení používají, se jedná o rychlý a citlivý screening chování účinných a pomocných látek ve farmaceutických směsích, čili získání přínosných informací pro formulaci léčivého přípravku.

Antihypertenzivum candesartan cilexetil je ve vodě špatně rozpustné léčivo. Tvorba komplexu s cyklodextriny by měla zlepšit rozpustnost tohoto léčiva. Cílem tohoto projektu je tedy porovnání kompatibility směsí candesartanu s různými druhy cyklodextrinů, příprava a analýza jejich komplexu.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum MŠMT (Rozhodnutí č. 21/2011) a dalších projektů MŠMT č. 604 613 7302 a č. 2B08021).

- [1] Selzer, T.; Radau, B.; Kreuter, J. Use of isothermal heat conduction microcalorimetry to evaluate stability and excipient compatibility of a solid

drug. *Int. J. Pharm.* 1998,171, 227–241

- [2] Kane, R.; Kuchekar, B. Preparation, physicochemical characterization, dissolution and formulation studies of telmisartan cyclodextrin inclusion complexes. *Asian. J. Pharm. [serial online]* **2010**, 4, 52-9.
 [3] Al Omari, A.; Al Omari, M.; Badwan, A.; Khaldoun, A. Effect of cyclodextrins on the solubility and stability of candesartan cilexetil in solution and solid state. *J. Pharm. Biomed. Anal.* **2011**, 54, 503–509.

3Po68 STANOVENÍ OBSAHU POLYBUTADIENU V HOUŽEVNATÉM POLYSTYRENU METODOU INFRAČERVENÉ SPEKTROMETRIE

Michael Schwarze¹

¹SYNTHOS Kralupy a.s., O. Wichterleho 810, 278 52 Kralupy nad Vltavou, ČR,

michael.schwarze@synthosgroup.com

Hlavním produktovým portfoliem společnosti SYNTHOS Kralupy a.s. je výroba butadienstyrenových kaučuků, začínající výroba polybutadienových kaučuků a také výroba zpěňovatelných a houževnatých polystyrenů.

Tento příspěvek je věnován možnostem stanovení obsahu elastomerní složky (polybutadienu) v houževnatém polystyrenu (HPS) metodou IČ spektrometrie. Výroba HPS zahrnuje 4 základní typy, lišící se obsahem polybutadienu, který se pohybuje v rozmezí 4,5 - 8,5%.

Běžně se k určení obsahu polybutadienu v HPS využívá nepřímé jodometrické titrace, která je založena na adici halogenu na dvojnou vazbu elastomerní složky HPS. Nevýhodou tohoto stanovení je časová náročnost, zejména při rozpouštění HPS.

Pro potřebu rychlého stanovení byla vyvinuta metoda stanovení obsahu elastomerní složky v HPS pomocí IČ spektrometrie. Ke stanovení obsahu polybutadienu se využívají absorpční pásy polystyrenu při 1027 cm⁻¹ a trans izomeru polybutadienu při 966 cm⁻¹. Při tomto vlnočtu (966 cm⁻¹) má samotný polystyren nezanedbatelnou absorpci; absorpční pás je složen z absorpce trans izomeru polybutadienu a polystyrenu, které od sebe nelze oddělit. Výsledek je správný pouze tehdy, má-li polybutadien použitý k výrobě HPS stejnou mikrostrukturu jako polybutadienový kaučuk použitý ke kalibraci.

Na základě statistického porovnání hodnot získaných jodometrickou titrací a metodou IČ spektrometrie lze konstatovat, že metodu IČ

spektrometrie je možno využiť ke stanovení obsahu elastomerní složky v HPS.

3Po69

ASSESSMENT OF PROPAGATION RATE COEFFICIENT, K_p , OF FREE-RADICAL POLYMERIZATION OF SULFOBETAINE AND PHOSPHOBETAINE METHACRYLIC MONOMERS

Patrik Sobolčiak,¹ Marek Stach,¹ Peter Kasák,^{1,*} Dušan Chorvát, Jr.,^{1,2} Igor Lacík^{1,*}

¹Polymer Institute SAS, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovak Republic,

e-mail: patrik.sobolciak@savba.sk

²International laser centrum, Ilkovicova 3, 812 19 Bratislava, Slovak Republic

Sulfobetaines *N*-(3-methacryloylamino)propyl-*N,N*-dimethyl-*N*-(3-sulfopropyl) ammonium betaine **1** and *N*-(2-methacryloyloxyethyl)-*N,N*-dimethyl-*N*-(3-sulfopropyl) ammonium betaine **2** and phosphobetaine 2-methacryloyloxyethyl phosphorylcholine **3** (Figure 1) are zwitterionic internal salts with positive ammonium and negative sulfonate or phosphate moiety in molecule. Zwitterionic polymers prepared from these monomers exhibit unique solution as well as biocompatible properties. [1]

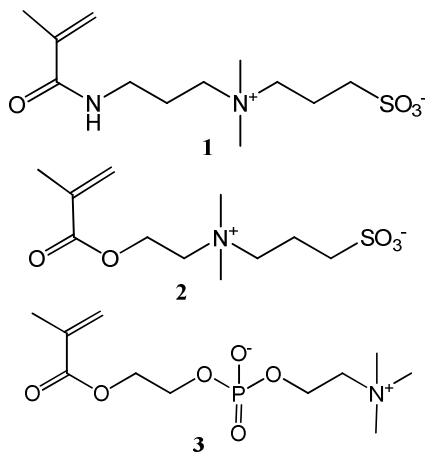


Figure 1: Chemical structures of **1**, **2** and **3**

The kinetics and mechanism of free-radical polymerization of this type of monomers is insufficiently known and require deeply understanding and correlation.

In this contribution we determinate propagation rate coefficients of free radical polymerization of methacrylic monomers **1**, **2** and **3** by means of pulsed laser polymerization (PLP) in conjunction with size-exclusion chromatography (SEC) [2] technique.

The PLP-SEC experiments were carried out within the concentration range of monomers from

5-50 wt % and at temperature between 15-80 °C. Propagation rate coefficients show similar behaviour to ionized methacrylic acid polymerized at higher degrees of monomer ionization [3]. The k_p values decrease only slightly in the studied monomer concentration range. The estimated Arrhenius parameters also indicate on the family behavior with respect to the polymerization of ionized methacrylate monomers in the aqueous solution.

This work was supported by the Scientific Grant Agency of the Ministry of Education of Slovak Republic under the Grant VEGA No. 2/0152/10

[1] Lowe A. B.; McCormick C. L. *Chem. Rev.* **2002**, 102, 4177-4189.

[2] Olaj, O. F.; Schnöll-Bitai, I.; Hinkelmann, F. *Makromol. Chem.* **1987**, 188, 1689-1702.

[3] Lacík, I.; Učňová, L.; Kukučková, S.; Buback, M.; Hesse, P.; Beuermann, S. *Macromolecules* **2009**, 42, 7753-7761.

3Po70

SMALL QUATERNARY AChE INHIBITORS FOR MG TREATMENT – SYNTHESIS, IN VITRO SCREENING AND MOLECULAR MODELLING STUDIES

Ondrej Soukup¹, Kamil Musilek¹⁻³, Marketa Komloova⁴, Ondrej Holas⁴, Anna Horova¹, Kamil Kuca¹⁻²

¹ Department of Toxicology and Centre of Advanced Studies, Faculty of Military Health Sciences, Trebesska 1575, 500 01 Hradec Kralove, Czech Republic

² University Hospital, Sokolska 581, 500 05 Hradec Kralove, Czech Republic

³ Department of Chemistry, University of Hradec Kralove, Rokitanskeho 62, 50003 Hradec Kralove, Czech Republic

⁴ Department of Pharmaceutical Chemistry and Drug Control, Faculty of Pharmacy in Hradec Kralove, Charles University in Prague, Heyrovskeho 1203, 500 05 Hradec Kralove, Czech Republic

Small quaternary acetylcholinesterase (AChE) inhibitors are used (e.g. pyridostigmine bromide, neostigmine bromide, ambenonium dichloride) are used for early Myasthenia gravis treatment [1]. Their peripheral effect allows sufficient quantity of acetylcholine available for decreasing amount of AChE receptors. Their side effects including gastrointestinal effects (nausea, intestinal obstruction), increased bronchial secretion, cardiac arrhythmia or cholinergic crisis are well described and limit their dosage and long-term treatment.

Novel small quaternary inhibitors were designed as peripherally acting compounds (pyridinium, quinolinium and isoquinolinium analogues) [2-3]. The *in vitro* ability was determined using IC50 values and kinetic constants. Inhibitory ability towards AChE was found superior to used drugs and non-competitive mechanism of inhibition was confirmed by the kinetic parameters and molecular modelling. The studies on modulation of cholinergic receptors are in progress.

The work was supported by the the grant of Ministry of Defense(Czech Republic) No. FVZ0000604 and Grant Agency Czech Republic P303/11/1907.

- [1] Garcia-Carrasco, M. et al. *Autoimmun. Rev.* 2007, 6, 373.
 [2] Komloova, M. et al. *Curr. Med. Chem.* 2010, 17, 1810.
 [3] Musilek, K. et al. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 2010, 20, 1763.

3Po71

REDUCTION OF BIOFOULING ON ELECTROCONDUCTING SURFACES

M. Stach^{1,*}, Z. Kroneková¹, P. Kasák¹, J. Kollár¹, M. Pentrák², M. Mičušík¹, D. Chorvát Jr.^{1,3}, T.S. Nunney⁴ I. Lacík^{1,*}

¹*Polymer Institute of the Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava 45, Slovak Republic*

²*Institute of Inorganic Chemistry of the Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, Slovak Republic*

³*International Laser Centre, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava, Slovak Republic*

⁴*Thermo Fisher Scientific, The Birches Industrial Estate, Imberhorne Lane, East Grinstead, RH19 1UB United Kingdom*

Electrografting is a powerful technique for modification of electroconductive surfaces with organic material. It is an electro-initiated process which requires a charged electrode and 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. Polymeric film may be used as anchoring layer for immobilization of drugs or as a layer reducing biofouling for implantable biosensors. In order to prepare non-biofouling surfaces, the electrografting of 2-(dimethylamino)ethyl methacrylate was performed and thin polymer films were formed on electroconductive surfaces. The electrografted

films were modified in the next step to sulfobetaine, i.e. the polymer film bearing the zwitterionic groups. The presence of the electrografted film and its modification were determined by contact angle measurements, infrared spectroscopy in reflectance mode and X-ray photoelectron spectroscopy. *In vitro* tests using adherent RAT-2 fibroblast cells and fluorescently labelled bovine serum albumin proteins showed that prepared zwitterionic films can be used in applications requiring the resistance against cell attachment and biofouling.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-0486-10. This contribution is also the result of the project implementation: Centre for materials, layers and systems for applications and chemical processes under extreme conditions – Stage II supported by the Research & Development Operational Programme funded by the ERDF.

3Po72

MOLEKULÁRNÍ MORFING – NOVÁ METODA PRO PROCHÁZENÍ CHEMICKÝM PROSTOREM

Daniel Svozil¹, David Hoksza^{1,2}

¹*Laboratoř informatiky a chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Fakulta chemické technologie, Technická 5, 166 28 Praha*

²*Katedra softwarového inženýrství, Matematicko-fyzikální fakulta, Univerzita Karlova, Malostranské náměstí 25, 118 00 Praha*

Pro obory, jako jsou chemická biologie či medicínální chemie, je jedním z klíčových prvků využití tzv. chemických knihoven. Chemické knihovny jsou databáze uchováající informace o strukturách nízkomolekulárních organických sloučenin použitelných při vývoji léčiv či v dalších průmyslových procesech. Tyto sloučeniny ovšem představují pouhý zlomek z tzv. chemického prostoru, což je soubor struktur všech možných organických látek. Výzkum chemického prostoru, jeho vlastností a jeho zajímavých částí, je potom velikou výzvou pro počítačové metody. V našem příspěvku představíme metodu Molpher pro systematické procházení chemického prostoru založenou na konceptu molekulárního morfingu. Pro dvě dané struktury – počáteční a cílovou – Molpher navrhne cestu v chemickém prostoru jako sekvenci příbuzných struktur. Cesta je generována iterativním aplikováním tzv. morfovacích operátorů odpovídajících jednoduchým chemickým změnám, jako jsou např. přidání či odstranění atomu nebo vazby.

Molekuly nacházející se na cestě představují tedy cílenou knihovnu, kterou je možno následně použít jako výchozí bod pro další počítačové či laboratorní experimenty.

Divide, chceš sem dát nějaké poděkování?

3Po73

PŘÍPRAVA A VLASTNOSTI HYDROFOBNÍCH SORBENTŮ NA ZÁKLADĚ POLYSACHARIDŮ

Jan Tůma¹, Andriy Synytsya¹, Milan Marounek², Jana Čopíková¹

¹Ústav chemie a technologie sacharidů, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6 Dejvice, Česká republika sinicaa@vscht.cz

²Výzkumný ústav živočišné výroby, Přátelství 815, 104 01 Praha 10 Uhřetěves, Česká republika

Chemická modifikace polysacharidů výrazně ovlivňuje jejich vlastnosti. Dá se očekávat, že deriváty pektinu a chitosanu budou mít v trávicím traktu jiné účinky než výchozí polysacharidy. Aminolýza HM pektinu pomocí *N*-oktadecylaminu vede ke vzniku *N*-oktadecylpektinamidů [1,2], který je zajímavý pro přípravu sorbentů schopných vázat lipidy (cholesterol, tuky, žlučové kyseliny). Podobné vlastností lze očekávat od *N,O*-palmitoyl chitosanu (**2**) vzniklého reakcí chitosanu s palmitoyl chloridem. Navázání *N*-methylových skupin na chitosan (**3**) či na *N,O*-palmitoyl chitosan (**4**) reakcí s methyl jodidem by mělo navíc ovlivnit sorpce žlučových kyselin na polysacharid.

Sorpční vlastnosti derivátů pektinu a chitosanu (**1–4**) byly porovnány s výchozími polysacharidy a s cholestyraminem, účinným syntetickým sorbentem žlučových kyselin. Cholát sodný a cholesterol byly zvoleny jako modelové látky pro studium kinetiky sorpce a sorpčních isoterem. Podle kinetických křivek byla zjištěna optimální doba inkubace dostatečná k tomu, aby došlo k rovnováze mezi volným a vázaným cholátem (cholesterolem). Počáteční rychlost sorpce byla u cholestyraminu výrazně vyšší než u **1–4**, avšak množství navázaného cholátu v rovnováze bylo přibližně stejné u obou sorbentů. Sorpční isotermy měly nelineární charakter a byly popsány pomocí Langmuir-Freundlichoveho modelu. Odlíšnosti v sorpčních isotermech lze vysvětlit různým mechanismem sorpce jednotlivými sorbenty. Pouze cholestyramin, **1** a **2** byly schopny účinně vázat cholesterol.

Práce vznikla s podporou grantu GA ČR č. 503/11/2479.

[1] Synytsya An., Čopíková J., Marounek M., Mlčochová P., Sihelníková L., Skoblya S., Havlátová H., Matějka P., Maryška M., Machovič V.: *Carbohydrate Polymers* 56 (2004), 169-179.

[2] Marounek M., Volek Z., Synytsya A., Čopíková J.: *Physiological Research* 56 (2007), 433-442.

3Po74

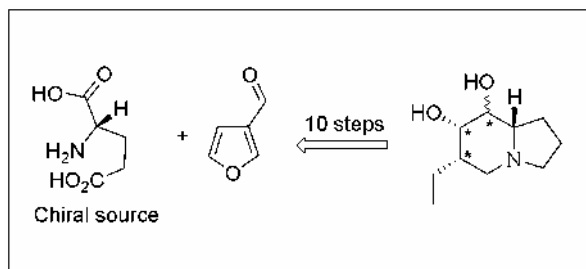
STEREOSELECTIVE SYNTHESIS OF NOVEL ALKYLINDOLIZIDINIOLS FROM GLUTAMIC ACID

Štefan Marchalín, Peter Šafář and Jozefína Žúžiová

Department of Organic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, SK-81237 Bratislava, Slovak Republic

An important part of our program, aimed at development of novel synthetic methods utilizing amino acids as cheap building blocks available in both enantiomeric forms, represents the synthesis of substituted indolizidines. Indolizidines with different degrees of unsaturation form part of the skeleton of numerous alkaloids. Of particular interest are carbohydrate-mimetic hydroxylated indolizidines and some of them are very effective and efficient inhibitors of glycosidases [1].

Recently, we have developed a highly diastereoselective and extremely simple method to provide alkylindolizidine diols in a few synthetic step sequence starting from *L*-glutamic acid and furan-3-carboxaldehyde (Picture 1). The simple procedure involves highly diastereoselective catalytic hydrogenation of the furan ring and regioselective THF-ring opening in the key synthetic steps [2]. The target new epimeric 6-ethylindolizidine-7,8-diol derivatives, related to the bioactive dihydroxylated indolizidine alkaloids are easily available in good yields and both high enantiomeric and diastereomeric purities. All of these attributes make this strategy very interesting and attractive for the design and synthesis of a novel range of indolizidines with different substituents and stereochemistry with promising biological profiles.



Picture 1.

The authors thank the Grant Agency of Slovak Republic, Grant No. 1/0429/11 and the Slovak Research and Development Agency under the contract

No. APVV-0210-07 and APVV-0204-10 for the financial support for this research program.

- [1] Michael J. P.: *Nat. Prod. Rep.* **2008**, 25, 139-165.
 [2] Šafář P., Žůžiová J., Tóthová E., Marchalín Š.; Prónayová N., Švorc L., Vrábel V., Comesse S., Daich A.: *Tetrahedron: Asymmetry* **2010**, 21, 623-630.

3Po75

PŘÍPRAVA

CYKLOHEXANKARBONITRILU - SROVNÁNÍ VÍCEKROKOVÉ A „ONE-POT“ SYNTÉZY POMOCÍ NÁSTROJŮ ZELENÉ CHEMIE

Richard Ševčík¹, Jan Šimbera², Pavel Pazdera¹

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

²Lučební závody Draslovka a. s. Kolín, Havlíčkova 605, 280 99 Kolín IV, Česká republika, draslovka@draslovka.cz

Pro potřeby průmyslové výroby byly navrženy tři nové více krokové “one-pot” metody přípravy cyklohexankarbonitrilu vycházející z cyklohexanonu jako výchozí látky. Na rozdíl od známých syntetických postupů¹ byly nové metody přípravy navrženy tak, aby všechny reakční kroky probíhaly v jednotném rozpouštědle a aby klíčový oxidační krok probíhal v katalytickém nebo stechiometrickém poměru reaktantů. Atomová ekonomika všech tří procesů je výhodnější, reakce probíhají s vysokou regioselektivitou a vznikající vedlejší produkty jsou buďto přírodní povahy – oxid uhličitý a dusík – nebo mohou být dále využity – chlorid sodný. Rozpouštědlo methanol a další pomocné látky (cyklohexan, katalyzátor) mohou být po recyklaci také znovu použity. Pro všechny tři nové postupy bylo vypracováno hodnocení dle EcoScale² a výsledky porovnány s dosud známými syntetickými metodami. Na popsané “one-pot” syntézy byly aplikovány i další hodnotící nástroje Zelené chemie včetně nástroje EATOS³, pro objektivnější hodnocení byl zaveden nový nástroj – Index udržitelnosti syntézy (Sustainability Index of the Synthesis - SIS). Cílem příspěvku je prezentace získaných výsledků, jejich porovnání a upozornění na úskalí jednotlivých hodnotících nástrojů, zejména u více krokových a “one-pot” syntéz.

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

- [1] P. A. Wender, M. A. Eissenstatt, N. Sappupo and F. E. Ziegler: *Organic Syntheses, Coll. Vol.* **6**, 334 (1988).
 [2] K. van Aken, L. Streckowski and L. Patiny: EcoScale, a semi-quantitative tool to select an organic preparation based on economical and ecological parameters, *Beilstein J. Org. Chem.*, **3**, 2 (2006).
 [3] M. Eissen, J. O. Metzger: *Chem. Eur. J.*, **8**, 3580 (2000).

3Po76

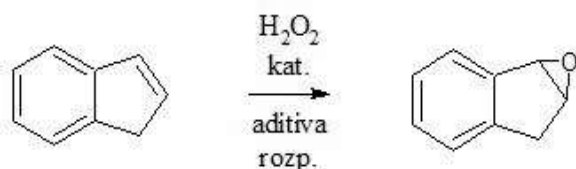
INDEN A JEHO VYUŽITÍ PŘI PŘÍPRAVĚ CHEMICKÝCH SPECIALIT

Martina Šteková¹, Eliška Vyskočilová¹, Libor Červený¹

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

Inden je aromatický uhlovodík, jehož deriváty mají řadu využití v různých oborech přípravy chemických specialit (farmaceutický a parfumářský průmysl, zemědělství, katalýza, atd.). Téma práce vzešlo od společnosti Unipetrol, a. s. Litvínov, která se intenzivně zabývá možnostmi zlepšení ekonomiky etylenové jednotky využitím a zhodnocením komponent obsažených v kapalných pyrolýzních frakcích [1]. Jednou z těchto komponent je právě inden. Inden patří do skupiny vedlejších produktů pyrolýzy označovaných souhrnným názvem „resin formers“, do které patří i celá řada dalších nenasycených uhlovodíků (methylstyreny, vinyltolueny, atd.). Tyto uhlovodíky se v současné době používají k výrobě uhlovodíkových pryskyřic, které se užívají jako složky lepidel, nátěrů a barev. V posledních letech je snaha tyto uhlovodíky izolovat a využívat je jako suroviny pro další zpracování.

Tato práce se zabývá přípravou vybraných derivátů indenu s ohledem na jejich možné využití v oblasti chemických specialit. Zkoumanou reakcí je epoxidace indenu na 1,2-epoxyindan (obr.1). Jako vhodný katalyzátor pro epoxidaci indenu [2,3] bylo vybráno methyltrioxorhenium (MTO). Oxidačním činidlem je peroxid vodíku. Cílem práce je optimalizovat reakční podmínky s katalyzátorem MTO v homogenní a heterogenizované formě na základě poznatků z literatury. 1,2-Epoxyindan může dále sloužit jako meziprodukt při syntéze dalších derivátů indenu (1-aminoindan-2-olu, indan-1,2-diolu, indanolů, indanonů, atd.).



Obr. 1 Schéma epoxidace indenu

Publikace byla podpořena z prostředků projektu UniCRE, financováno ze Strukturálních fondů EU a státního rozpočtu ČR a za finanční podpory Grantové agentury České republiky (grant č. 203/08/H032. Autor dále děkuje IGA Praha za finanční podporu z grantů A1-FCHT-2011-013 a A1-FCHT-2011-010. Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č.21/2011).

- [1] J. Lederer, T. Herink, P. Fulín, *Chemické listy*, **100**, p. 53 (2006).
 [2] S. Yamazaki, *Org. Biomol. Chem.*, **8**, p. 2377 (2010).
 [3] S. Yamazaki, *Org. Biomol. Chem.*, **5**, p. 2109-2113 (2007).

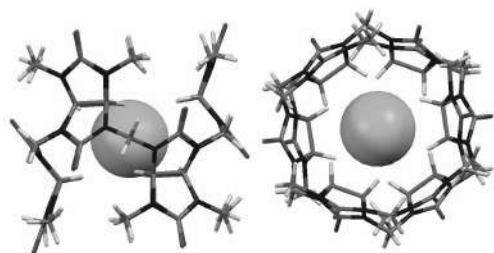
3Po77

MAKROCYKlická SLOUČENINA BAMBUS[6]JURIL - SYNTÉZA A SUPRAMOLEKULÁRNÍ CHEMIE

Jan Švec¹, Vladimír Šindelář^{1*}

¹ Ústav chemie, Masarykova Univerzita, Kamenice 5, Brno, 625 00, sindelar@chemi.muni.cz

Diskutována bude příprava makrocyclické sloučeniny bambus[6]jurilu (BU6) a modifikovaného BU6. BU6 jsme připravili reakcí 2,4-dimethylglykolurilu s formaldehydem v zředěné HCl při laboratorní teplotě. BU6 tvoří stabilní supramolekulární interní komplexy s aniony. Halogenidy jsou v makrocyclicku vázány se stoupající afinitou v pořadí $F^- < Cl^- < Br^- < I^-$. Komplex BU6 s interně vázaným anionem je dobře rozpustný ve vybraných rozpouštědlech. Naopak prázdný BU6, připravený z komplexu vyvázáním aniontu, se nerozpouštěl v žádném ze studovaných rozpouštědel. BU6 se rozpustil až po přidání aniontu do roztoku. Tyto vlastnosti jsme využili pro stanovení asociačních konstant mezi BU6 a vybranými anionty.



Obr. 1 Komplex BU6 s Cl⁻.

Tato práce vznikla za podpory GAČR (grant P207/10/0695) a Evropské unie (CETOCOEN, CZ.1.05/2.1.00/01.0001; spravovaný MŠMT ČR).

- [1] Svec J., Necas M., Sindelar V.: *Angew. Chem. Int. Ed.* **49**, 2378 (2010).
 [2] Svec J., Dusek M., Fejfarova K., Stacko P., Klán P., Kaifer A. E., Li W., Hudeckova E., Sindelar V.: *Chem. Eur. J.* **17**, 5605 (2011).

3Po78

PREPARATION OF PYRAZOLE SYSTEMS FROM ACTIVATED ENOLETHERS

Denisa Tarabová, Viktor Milata

Department of Organic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK-812 37, Bratislava, Slovakia

Different manners of pyrazole skeleton formation were realized. Many pyrazole systems serve as useful tool and potential drug for different kinds of diseases (Alzheimer disease, cancer)^[1]. Pyrazole ring is usually prepared from appropriate activated enolethers with various binucleophiles (hydrazine hydrate, methylhydrazine, phenylhydrazine)^[2]. Nucleophilic vinylic substitution takes place (S_NV) in the first step followed by the pyrazole ring formation in second nucleophilic substitution-cyclization.

The goal of our work was to prepare variously substituted pyrazole/pyrazolone systems in order to study their tautomeric forms.^[3] Importance of this study lies in the finding more about the positions of individual hydrogen atoms, i.e. the equilibrium between the two or more tautomeric forms that may be present, to learn energy difference between the alternative forms and formation of intra/intermolecular hydrogen bonds, all of which have important biological implications. This study can guide us in the interpretation of reaction mechanism in any study of reactivity. All of these heterocyclic systems will be submitted to studies of their biological activity.

The authors are grateful for financial support to Slovak Grant Agency VEGA (No. 1/0660/11).

- [1] Sawyer J. S.; Beight D. W.; Britt K. S.; Anderson B. D.; Campbell R. M.; Goodson Jr. T.; Herron D. K.; Yu- Li H.; McMillen W. T.; Mort N.; Parsons S.; Smith E. C. R.; Wagner J. R.; Yan L.; Zhang F.; Yingling J. M.: *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2004**, *14*, 3581.
 [2] Černuchová, P.; Vo-Thanh, G.; Milata, V.; Loupy, A.; Jantová, S.; Theiszová, M. *Tetrahedron* **2005**, *61*, 5379.

[3] Elguero, J.; *Comprehensive Heterocycl. Chem. II*, 1996, 3, 1.

3Po79 ORGANOKATALYTICKÉ REAKCIE S VYUŽITÍM SOMO AKTIVÁCIE

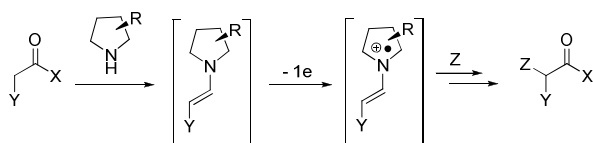
Pavol Tisovský, Mária Mečiarová, Radovan Šebesta

Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra organickej chémie, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, Slovenská republika;
tisovsky@fns.uniba.sk

Asymetrická organokatalýza, ktorá využíva malé organické molekuly ako katalyzátory stereoselektívnych transformácií, je veľmi prudko sa rozvíjajúca oblasť modernej organickej syntézy. Významne k tomuto rozvoju prispel MacMillan, ktorý rozvinul koncept imínovej katalýzy [1]. Súbežne Barbas a List [2] rozpracovali myšlienku aktivácie karbonylových zlúčenín prostredníctvom tvorby enamínov s chirálnymi sekundárnymi amínmi, čo vedie k rozvoju enantioselektívnych α -funkcionalizácií aldehydov a ketónov s veľkým počtom elektrofilov.

Relatívne novou oblasťou organokatalýzy je organokatalytická SOMO (*singly occupied molecular orbital*) aktivácia karbonylových zlúčenín. Pri SOMO aktivácii sa vytvára chirálny kation-radikál, ktorý môže reagovať so širokou paletou nukleofilných činidiel (Schéma) [3]. Takto aktivovaná karbonylová zlúčenina podlieha rôznym enantioselektívnym katalytickým transformáciám, ktoré doposiaľ neboli uskutočniteľné alebo na ich priebeh bolo treba vytvoriť špeciálne podmienky.

Prezentovaná práca je zameraná na štúdium nových „somofilov“ a ich uplatnenie v SOMO organokatalytických reakciách s dôrazom na α -funkcionalizácie karbonylových derivátov a tiež nové reakcie tvorby C-C väzieb.



Autori ďakujú za finančnú podporu projektu UK/110/2011.

- [1] Ahrendt, K. A.; Borths, C. J.; MacMillan, D. W. C. *J. Am. Chem. Soc.* **2000**, 122, 4243-4244.
[2] List, B.; Lerner, R. A.; Barbas III, C. F. *J. Am. Chem. Soc.* **2000**, 122, 2395-2396.
[3] Beeson, T. D.; Mastracchio, A.; Hong, J-B.; Ashton, K.; MacMillan, D. W. C. *Science* **2007**, 316, 582-585.

3Po80 AN EFFICIENT, RAPID TRIFLUOROACETYLATION OF ACTIVATED THIOPHENE AND PYRROLE DERIVATIVES.

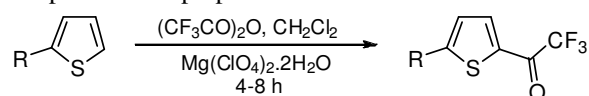
Peter Tisovský¹, Anita Andicsová¹, Jozef Kožíšek², Marek Fronc², Daniel Végh¹

¹Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry,

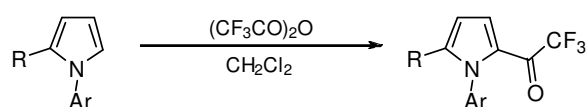
²Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics Slovak University of Technology, Radlinského Street 9, SK-812 37 Bratislava, Slovakia,
peter.tisovsky@stuba.sk

The obtention of trifluoromethyl ketones is a considerable currently area in organic synthesis due to the prevalence of this group in the agrochemistry, pharmaceutical industry and material science [1]. The powerful inductive electron-withdrawing effect of the trifluoromethyl group renders these ketones exceptionally electrophilic. Aromatic trifluoromethyl ketones can serve as a building blocks for 1,4-dicarbonyl compounds [2] which are important synthones for heterocycle synthesis.

We have found that thiophene and pyrrole derivatives can be acylated with trifluoroacetic anhydride catalyzed by $Mg(ClO_4)_2 \cdot 2H_2O$ in dichloromethane. According to this procedure novel family of trifluoroacetyl compounds was prepared.



R = CH₃, 2-thienyl, 5-metyl-2-thienyl, 2,2'-bithienyl



R = H, CH₃
Ar = C₆F₅, C₆H₄F,

Structures of target compounds were proved by IR, UV, ¹H NMR, ¹³C NMR and ¹⁹F NMR spectral methods and by X-ray analysis.

This work was financially supported by grant from the Ministry of Education of the Slovak Republic No. 1/0660/11 and 1/0679/11 APVV-0202-10

- [1] a) Filler, R.; Kobayashi, Y.; Yagupolskii, L. M. *Organofluorine Compounds in Medicinal Chemistry and Biomedical Applications*, Elsevier: Amsterdam, 1993. b) Banks, R. E.; Smart, B. E.; Tatlow, J. C. *Organofluorine Chemistry – Principles and Commercial Applications*, Plenum Press: New York, 1994. c) Hudlicky, M. *Chemistry of Organic Fluorine Compounds*, Ellis Horwood Ltd: Chichester, 1992.

[2] Baneji, A., Bandyopadhyay, D., Basak, B., Sur K.

R.; Paul, N. J., Banerji J., Chatterjee, A.
Tetrahedron Letters, 46, 2005, 7033.

3Po81**REAKCE FTALALDEHYDU
S DUSÍKATÝMI NUKLEOFILY**

Jiří Urban¹, Jiří Ludvík¹, Jiří Klíma¹, Ludmila Šimková¹, Alan Liška¹

¹Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v. v. i., Dolejškova 3, CZ-182 23, Praha 8,
jiri.urban@jh-inst.cas.cz

Reaktivita ftalaldehydu je již dlouho známa [1]. Reakce s nukleofily při ortho poloze karbonylových skupin umožňuje řadu zajímavých reakcí. Například reakce s aminokyselinami je základem analytické metody pro jejich stanovení [2]. Je též známá desinfekční účinnost ftalaldehydu, která spočívá v reakci s amino a sulfhydrylovými skupinami. Při této reakci vzniká množství látek, z valné části barevných a vysokomolekulárních.

V rámci osvětlení mechanismu reakce ftalaldehydu s aminy byl použit například kolamin a amoniak. Reakce byla provedena jednak v acetonitrilu a jednak ve vodě. Reaktanty byly míchány v různém poměru. Výsledné produkty byly izolovány chromatograficky a identifikovány pomocí ¹H a ¹³C NMR a nebo rentgenostrukturální analýzou.

Dále byl průběh reakce sledován polarograficky, pomocí UV/Vis spektrometrie, fluorescenční spektrometrie a hmotnostní spektrometrie. Polarografická měření byla prováděna ve dvou různých pufrch, borátovém a amoniakálním. Ukázalo se, že v borátovém pufru se s rostoucím pH rychlost reakce zvyšuje, zatímco v amoniakálním pufru je tomu naopak. V průběhu reakce lze polarograficky a na fluorescenčních spektrech pozorovat více meziproduktů v závislosti na podmínkách reakce. Reakční mechanismus je složitý a, jak ukazuje hmotnostní spektrometrie, vede ke třem produktům.

Tato práce vznikla s podporou grantu KONTAKT (MŠMT) č. ME 09 002. Poděkování patří Mgr. Miroslavu Poláškoví, Ph.D. za naměření hmotnostních spekter.

- [1] Petr Zuman, Chem. Reviews, 104, 3217, (2004).
[2] Marc Roth, Anal. Chem., 43, 7, (1971).

3Po82**TEPELNĚ ODOLNÉ POLYMERY PRO
IDENTIFIKAČNÍ TĚLÍSKA VÝBUŠIN**

Miroslav Večeřa¹, Luboš Prokůpek¹, Miroslav Štancl²

¹Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Studentská 573, 532 10 Pardubice
²Explosia, a.s., Semtín 107, 530 50 Pardubice

Práce se zabývá výběrem vhodných polymerních materiálů pro přípravu identifikačních tělísek potřebných k povýbuchové identifikaci výbušin. Byly zkoumány vlastnosti vybraných speciálních typů epoxidových pryskyřic, v kombinaci s vhodnými tvrdidly. Dále byla použita směsná pojiva na bázi polyimidových laků. V případě epoxidových pryskyřic byly připraveny vzorky polymerních nosičů jednak na bázi zalévací, speciální pryskyřice Veropal, plněné silikátovým plnivem ke zvýšení tepelné odolnosti. Druhou pryskyřicí byla epoxidová tetrabromdianová pryskyřice. Pro vytvrzení byla zvolena tvrdidla poskytující vysokou tepelnou odolnost. Polyimidové laky byly vybrány pro své jedinečné tepelné vlastnosti.

K vytvoření kódu obsahujícího informace o výbušině byly použity směsi oxidů spolu se železem, které poskytuje tělískům magnetické vlastnosti. Byla stanovena tepelná odolnost pro různé koncentrace oxidů. Pro snadnější povýbuchové dohledání byla tělíska aditivována fluorescenčními barvivy. Po vyhodnocení byly vybrány nejvhodnější poměry oxidů a spolu s pryskyřicí zhomogenizovány s trhavinou.

Klíčová slova: značkování výbušin, identifikační tělíska, epoxidové pryskyřice, polyimidy.

Autoři děkují za finanční podporu při řešení této práce v rámci projektu MPO - TIP, FR-T11/125.

3Po83**PŘÍPRAVA POLYAROMATICKÝCH
DENDRIMERŮ NA BÁZI APIGENINU**

Petr Vinš¹, Fernando Cossío², Pavel Drašar¹

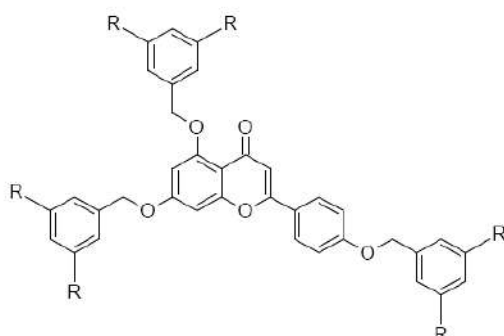
¹VŠCHT Praha, Technická 5, 16628 Praha 6;

²UPV/EHU, 20018 San Sebastián, Spain;

petr.vins@vscht.cz

Apigenin je přírodní látka používaná jako žluté barvivo a patří mezi flavony vykazující fluorescenci. Byla připravena série polyaromatických dendrimerů nulté až čtvrté generace, u kterých apigenin slouží jako střed molekuly. Jejich konvergentní syntéza vycházela z předchozí přípravy polyaromatických disubstituovaných dendronů[1] s bromidovou

skupinou na vazebném místě, a až následné konjugace s flavonem, ktoré bylo dosaženo etherifikací jeho fenolových skupin. Pro potvrzení cílových struktur bylo použito technik $^1\text{H-NMR}$ a hmotnostní spektrometrie s metodou MALDI-TOF pro těžší dendrimery. Získané látky jeví modrou fluorescenci a cílem práce je porovnání jejich spektrálních vlastností mezi sebou, zejména emisních fluorescenčních spekter v závislosti na generačním čísle dendrimera. V návaznosti na výsledky u této série bude další studie provedena u podobných dendrimera s jiným fluorescentním heterocyklem ve středu.



Obr. 1 Obecná struktura připravených dendrimera

Práce je podpořena grantem IGA VŠCHT číslo A2 FPBT 2011 045 a grantem MŠMT MSM 6046137305.

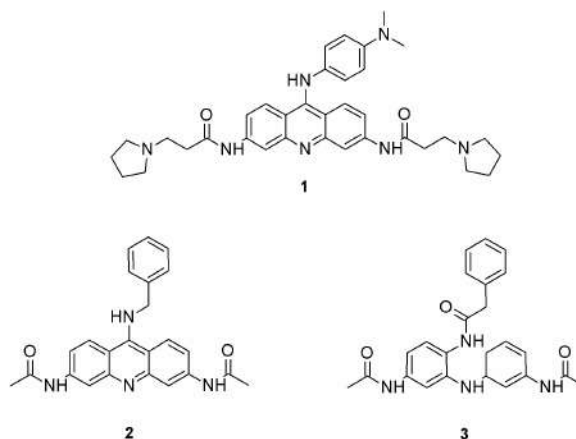
[1] C. J. Hawker, J. M. J. Fréchet.: *JACS* **1990**, *112*, 7638.

3Po84 DERIVÁTY AKRIDÍNU AKO INTERKALÁTORY DNA KVADRUPLEXU

Mária Vojtičková, Ladislav Janovec, Ján Imrich

Katedra organickej chémie, Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika, Moyzesova 11, SK-04001 Košice

Trisubstituované deriváty akridínu sú známe ako inhibitory telomerázy, ktorých princíp účinku je založený na nepriamej inhibícii cez ich selektívnu interakciu s DNA kvadruplexom [1]. Naša práca je zameraná na syntézu nových 3,6,9-substituovaných akridínov ako analógov BRACO-19 (**1**) [2]. Cieľom bolo nájsť vhodné reakčné podmienky prípravy kľúčovej zlúčeniny **2** vychádzajúc z amidu príslušne substituovanej difenylaminokarboxylovej kyseliny **3** pomocou Bischler-Napieralskiho cyklizácie. Plán syntézy vychádza z našich predchádzajúcich poznatkov o spájaní aromatických skeletov Ullmann-Jordanovou reakciou so zámerom zlepšiť efektivitu syntézy a zvýšiť stabilitu finálnych produktov.



Práca bola finančne podporená agentúrou MŠ SR VEGA (grant č. 1/0097/10, 1/0672/11), štátnym programom NMR (grant č. 2003SP200280203) a grantovým programom UPJŠ-VVGS (grant č. 7/09-10).

[1] Neidle, S., Thurston, D.E. *Nat. Rev. Cancer* **5**, 285 (2005)

[2] Campbell, N.H., Parkinson, G.N., Reszka, A.P., Neidle, S. *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 6722 (2008)

3Po85 VYSOKOMOLEKULÁRNÍ POLYMERNÍ SYSTÉMY VYUŽITELNÉ PŘI LÉČBĚ A DIAGNOSTICE PEVNÝCH NÁDORŮ

L. Vystrčilová¹, T. Etrych¹, S. Hoffmann², K. Mäder², K. Ulbrich¹

¹Ústav Makromolekulární Chemie, Akademie Věd České Republiky, v.v.i.,
162 06 Praha 6, Česká Republika

²Institute of Pharmacy; Martin-Luther-University of Halle-Wittenberg; Wolfgang-Langenbeck-Str. 4, D-06120 Halle-Saale, Germany

V posledních letech jsou v naší laboratoři intenzivně studovány lineární, roubované a hvězdicovité kopolymery na bázi *N*-(2-hydroxypropyl)methakrylamidu (HPMA) využitelné jako nosiče léčiv při léčbě nádorových onemocnění. Polymerní konjugáty obsahují protirakovinné léčivo doxorubicin (Dox) navázané na polymer hydrolyticky štěpitelnou hydrazonovou vazbou, stabilní při pH 7.4 (pH krve) a hydrolyticky labilní při pH 5.0 (pH endozomů buněk)¹. Vysoká molekulová hmotnost polymerů zvyšuje akumulaci a tím i terapeutický efekt připravených konjugátů díky EPR (efekt zvýšené propustnosti a zádrže) efektu²⁻³.

Cílem této práce je příprava vysokomolekulárních polymerních systémů vhodných pro léčbu a současnou diagnostiku pevných nádorů. S tímto cílem byly připraveny syntetické lineární kopolymery ($M_w \sim 30\,000$) a hvězdicovité

vysokomolekulární kopolymery ($M_w \sim 250\,000$) na bázi HPMA, značené fluorescenčními značkami s rozdílnou vlnovou délkou excitace. Značka s maximem absorpce při 676 nm (Dyomics-676) byla vázána na polymer hydrolyticky štěpitelnou hydrazonovou vazbou (model léčiva), značka s maximem absorpce při 782 nm (Dyomics-782) byla vázána amidovou stabilní vazbou (značený polymer). Rychlost uvolňování Dyomics-676, modelového léčiva, ve fosfátových pufrách o pH 5.0 a 7.4 byla studována na 4 různých derivátech Dyomix-676 a bylo prokázáno, že rychlost uvolňování je závislá na struktuře použité spojky (oxokyselina použitá pro zavedení keto skupiny do Dyomix-676). Biologické testy ukázaly, že k uvolňování modelového léčiva dochází převážně v nádorové tkáni, kde je akumulováno, zatímco samotný polymer je spíše homogenně distribuován po organismu.

Tato práce byla podporována GA ČR (grant č.P301/11/0325)

- [1] Etrych T., Mrkvan T., Chytil P., Koňák Č., Říhová B., Ulbrich K., J. Appl. Polym. Sci 109(5), 3050-3061 (2008)
- [2] Etrych T., Chytil P., Mrkvan T., Šírová M., Říhová B., Ulbrich K., J. Control. Release, 132, 184-192 (2008)
- [3] Etrych T., Strohalm J., Chytil P., Říhová B., Ulbrich K., J. Control. Release, DOI: 10.1016/j.jconrel.2011.06.015

3Po86 IMOBILIZOVANÉ METHYLTRIOXORHENIUM PRO METATÉZNÍ REAKCE

Radka Zdeňková, Eliška Vyskočilová - Leitmannová, Libor Červený

Ústav organické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická Praha, Technická 5, 116 28 Praha 6, Česká republika, Radka.Zdenkova@vscht.cz

Methyltrioxorhenium (MTO) [1] je homogenní katalyzátor, který může být použit v celé řadě reakcí. Jeho imobilizací na různé nosičové materiály, lze získat katalytický systém aktivní pro metatéze olefinů. Zvláště pak, pokud je MTO imobilizován na aluminu modifikovanou $ZnCl_2$ nebo alumosilikáty, katalyzuje i metatéze olefinických látek obsahující heteroatom.

Tato práce se zabývá metatezními reakcemi, kde se jako katalyzátor využívá heterogenizovaný MTO. Jako substráty pro metatéze byly použity methyl undec-10-enoát, allylacetát, allylpropionát a allylhexenoát. Imobilizace MTO byla provedena na několik nosičových materiálů (Siral 40, Siral 20, alumina), případně jejich

modifikovanou formu ($ZnCl_2/Al_2O_3$) a byl zkoumán vliv takto upraveného katalyzátoru na průběh reakce. Reakce byly provedeny za teploty 25, 40 a 60°C s heterogenizovaným katalyzátorem obsahujícím 2,5 hm.% Re. Nejlepších výsledků bylo dosaženo při použití $ZnCl_2/Al_2O_3$ jako nosičového materiálu a teplotě reakce 60°C. Při použití methyl undec-10-enoátu jako substrátu bylo dosaženo 94,8 % konverze a téměř 100 % selektivity na požadovaný produkt po 22 hodinách reakce.

Autoři děkují IGA Praha za finanční podporu z grantů A1-FCHT-2011-013 a A1-FCHT-2011-010, financovaných z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č.21/2011). Dále děkují Grantové agentuře České republiky (203/08 H032).

- [1] W.A. Herrmann, W. Wagner, U.N. Flessner, U. Volkhardt, H. Komber, Angew. Chem., 1991, 30, 1636.

3Po87 INOVACE ZPŮSOBU VÝROBY DIHYDROISOJASMONÁTU

Karel Zelinka¹, Radim Ščigel¹, Jan Šimbera^{1,2}, Pavel Pazdera²

¹*Lučební závody Draslovka a.s. Kolín, Havlíčkova 605, 280 99 Kolín, Czech Republic*

²*Centrum pro syntézy za udržitelných podmínek a jejich management, Ústav chemie, Masarykova univerzita, Kotlářská 2, 611 37 Brno, Czech Republic
karel.zelinka@draslovka.cz*

Dihydroisojasmonát (methyl-2-hexyl-3-oxocyklopentankarboxylát) je fragrance používaná v různých vonných kompozicích. Základem jeho výroby je tříkroková syntéza, kdy v prvním kroku je z výchozího 2-hexylcyklopent-2-en-1-onu bazicky katalyzovanou adicí kyanovodíku vyroben nitril, který je následně kyselé hydrolyzován na odpovídající karboxylovou kyselinu, která je esterifikována methanolem na methylester. Produkt je z reakční směsi separován extrakcí a následně přečištěn vakuovou rektifikací. Nyní byl nalezen technologicky i ekonomicky výhodný one-pot proces, kde je dosahováno výtěžků esteru okolo 85% (vztaženo na výchozí enon).

- [1] Polak's Frutal Works N.V.: patent DE2154244 (1972).

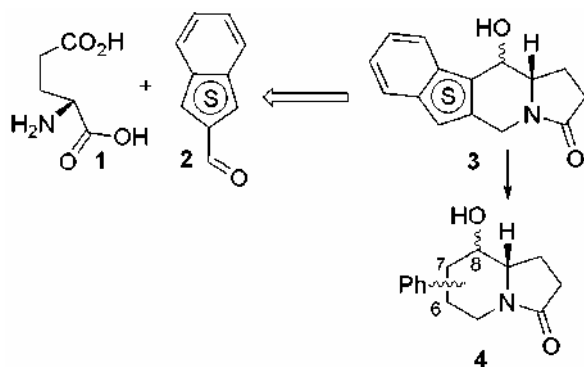
3Po88 DIASTEREOSELECTIVE REDUCTIVE DESULFURIZATION OF BENZOTHIENOINDOLIZINES

Jozefína Žúžiová, Peter Šafář and Štefan Marchalín

Department of Organic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, SK-81237 Bratislava, Slovak Republic

Bicyclic alkaloids such as azabicyclo[4.3.0]nonanes, commonly known as indolizidines, or their unsaturated analogues are among of the most important structural motifs found abundantly in nature. The spectrum of biological activity displayed by these natural structures is remarkable in its diversity and efficacy [1].

We have successfully synthesized novel enantiopure benzothieno analogues **3** of the bioactive alkaloid tylophorine in six steps starting from readily available benzo[*b*]thiophene-2(3)-carboxaldehyde (**1**) and (*S*)-glutamic acid (**2**) (Picture 1). Diastereoselective desulfurization of hexahydrobenzo[*f*]thienoindolizines were studied and its utility as a key step in the synthesis of 6(7)-phenylindolizidines and 6(7)-phenylindolizidin-8-ols related to alkaloids was confirmed. The stereochemical course of these reactions has been governed by highly preferred *exo* attack of reagents at the *convex* face of this rather rigid tricyclic skeleton. We have improved our uncommon strategy which uses a reductive desulfurization of the chiral heterocyclic sulphur systems with a Raney-nickel as a reducing agent to provide various substituted indolizidines and corresponding indolizidinols related to alkaloids [2].



Picture 1

The authors thank the Grant Agency of Slovak Republic, Grant No. 1/0429/11 and the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-0210-07 and APVV-0204-10 for the financial support for this research program.

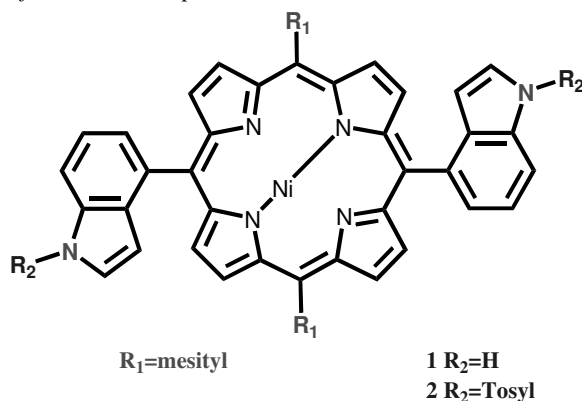
- [1] Michael, J. P.: Nat. Prod. Rep. **2008**, 25, 139-165.
[2] Šafář P., Žúžiová J., Bobošíková M., Marchalín Š., Prónayová N., Comesse S., Daïch A.: Tetrahedron: Asymmetry **2009**, 20, 2137-2144.

3Po89 SYNTHESIS AND OPTICAL PROPERTIES OF NOVEL *BIS*-(INDOLE-4-)PORPHYRIN NICKEL COMPLEXES

Marek Weclawski,^{†‡} Daniel Gryko^{‡†}, Mariusz Tasior[†]

[‡] Department of Chemistry, Warsaw University of Technology, Noakowskiego 3, 00-664, Warsaw, Poland

[†] Institute of Organic Chemistry of the Polish Academy of Sciences, Kasprzaka 44/52, 01-224 Warsaw, Poland



Bis-(indole-4-)porphyrins were synthesized by condensation of indole-4-carboxaldehydes and 5-mesityldipyrromethane, followed by oxidation with 2,3-dichloro-5,6-dicyano-1,4-benzoquinone. Subsequently, nickel complexes were prepared by reaction with Ni(acac)₂ under mild conditions. The porphyrin possessing tosyl- group exhibits highest solubility and stability. The structure and purity of all new compounds were confirmed by ¹H and ¹³C NMR, UV-Vis, MS and elemental analysis.

3Po90 METHOD OF PREPARATION AND SPECTRAL CHARACTERIZATION OF N- SUBSTITUTED AMINO ACID DERIVATIVES

Atanas Chapkanov^{1*}, Tatiana Dzimbova²,
Bojidarka Ivanova³

¹Department of Chemistry, FM N S, SWU "N. Rilski",
66 "I. Mihailov" Str., 2700 Blagoevgrad, Bulgaria,
chapkanov@swu.bg

²Institute of Molecular Biology, Bulgarian Academy of
Sciences, 21 Acad. G. Bonchev str., 1113 Sofia,
Bulgaria, tania_dzimbova@abv.bg

³Faculty of Chemistry, Sofia University, 1 J. Boucher
Boulevard, Soda 1164, Bulgaria, ahbi@chem.uni-
sofia.bg

This investigation can be considered as a part of systematic synthetic, spectroscopic and structural investigations on amino acids, their derivatives and small peptides¹⁻³. The elaboration of simple and efficient method for preparation of N-acetyl derivatives of α -amino acids (L-Ser, L-Leu, L-Ileu, L-proline) and their IR-spectral characterization were carried out. The N-acetyl amino acid derivatives were prepared using acetic anhydride in basic conditions at room temperature. N-Acetyl-N'-methyl amides of amino acid were synthesized by mixed anhydride procedure – using Piv-Cl as a reagent. The development of effective methods of obtaining N-acetyl derivatives of amino acids has great practical importance. Conventional and specific IR-LD spectral analysis of oriented solid sample as a nematic liquid crystal suspension of amino acid as zwitterionic and intermediates compounds was performed. The obtained spectroscopic data were used for assignation of the IR- characteristic bands of the corresponding compounds accompanied with structural prediction.

Key words: α -amino acids, N-acetyl-derivatives, IR-LD - spectral analysis

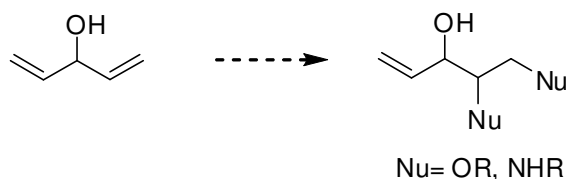
- [1] Ivanova, B.B., Arnaudov, M.G., Bontchev, P.R., (2004) Linear-dichroic infrared spectral analysis of Cu (I)-homocysteine complex, *Spectrochim. Acta*, 60(A), 855 - 862.
- [2] Chapkanov, A.G. and Zareva, S.Y., (2010) L-Valine and L-Proline - solid-state IR-LD spectroscopic study, *Protein & Peptide Letters*, 17(3), 347-350
- [3] Chapkanov, A.G., Zareva, S.Y. (2009) Structural and IR-spectroscopic elucidation of dipeptide L-threonyl-L-methionine in solid-state. *Protein & Peptide Letters*, 16(11), 1277-1280.

3Po91 AMINOHYDROXYLATIONS OF DIVINYLCARBINOL. FORMAL SYNTHESIS OF JASPINE B.

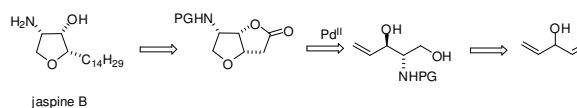
Ol'ga Karlubíková, Tibor Gracza

Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812
37 Bratislava, Slovakia, olga.karlubikova@gmail.com

Divinylcarbinol represents distinguished substrate for asymmetric functionalisation of double bond. Sharpless asymmetric epoxidation of this substrate has been successfully used in numerous total syntheses of natural products [1]. According to our knowledge asymmetric aminohydroxylation of this synthon, has not been studied yet.



As Sharpless asymmetric aminohydroxylation [2] turned out to be disappointing in terms of yield, regioselectivity and diastereoselectivity, we have looked up to some novel approaches to the bisfunctionalisation of double bond [3].



Product of aminohydroxylation of divinylcarbinol has been used in palladium catalysed oxycarbonylation resulting bicyclic lactone, intermediate in the synthesis of natural jaspine B.

This work has been supported by Grant Agency for Science (VEGA No. 1/0236/09 1/0115/10 APVV, Bratislava, project No. LPP-0071-09) and EU Structural Funds (ITMS 26240120001 and 26240120025).

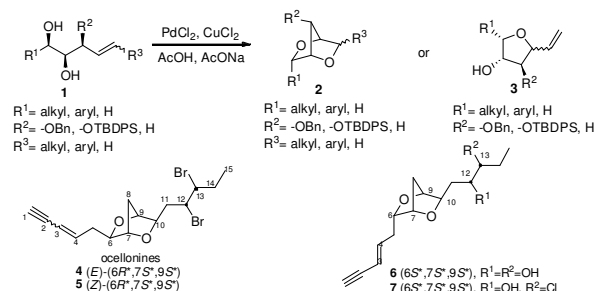
- [1] Romero A.; Wong Ch. *J. Org. Chem.*, **2000**, 65, 8264–8268; Singh S. Guiry P. J. *J. Org. Chem.*, **2009**, 74, 5758–5761; O'Sullivan t. P.; Vallin, K.; Shah, A. S.; Fakhry, J.; Maderna, P.; Scannell, M.; Sampaio, A.; Perretti, M.; Godson, C.; Guiry P. J. *J. Med. Chem.*, **2007**, 50, 5894–5902
- [2] Li, G.; Angert, H. H.; Sharpless, K. B. *Angew. Chem. Int. Ed.* **1996**, 35, 2813-2817
- [3] Liu G.; Stahl, S. S. *J. Am. Chem. Soc.*, **2006**, 128, 7179–7181.

3Po92**PALLADIUM CATALYSED SYNTHESIS OF BICYCLIC ETHERS**

M. Palík, T. Gracza

Slovak University of Technology, Radlinskeho 9, 812
37 Bratislava, Slovakia, E-mail:
miro.palik@gmail.com

Domino reactions have developed into an exceptionally efficient tool in organic synthesis by taking advantage of the fact that two or more bonds can be formed in a consecutive manner without isolating the intermediate products. In the course of our program [1, 2] directed towards the application of Pd(II)-catalysed domino reactions in natural product synthesis we have studied Pd(II)-Cu(II)-catalysed bicyclisation of unsaturated polyols. Herein, we report on the chemo-, regio- and stereoselectivity of cyclisations and bicyclisations of enitols.



The Pd-Cu-catalysed bicyclisation of diols is planned as a key transformation in a synthetic study towards ocellonines, a biologically interesting non terpenoid C₁₅ acetogenines produced by marine derived organisms. [3]

This work has been supported by Grant Agency for Science (VEGA No. 1/0236/09 1/0115/10 APVV, Bratislava, project No. LPP-0071-09) and EU Structural Funds (ITMS 26240120001 and 26240120025).

- [1] Gracza, T.; Hasenöhrl, T.; Stahl, U.; Jäger, V. *Synthesis* 1991, 1108-1118. Kapitán, P.; Gracza, T. *Tetrahedron: Asymmetry* 2008, 19, 38.
- [2] Szolcsányi, P.; Gracza, T. *Chem. Commun.* 2005, 3948., Babjak, M.; Remeň, L.; Szolcsányi, P.; Zálupský, P.; Miklós, M.; Gracza, T. *J. Organomet. Chem.* 2006, 691, 928.,
- [3] Martin, J. D.; Darias, J. In „Marine Natural Products“; Scheuer, P.J., Ed.; Academic Press: New York, 1978; Vol. 1, Chapter 3.

3Po93**ISOLATION PROCESS OF POLYPHENOLIC-POLYSACCHARIDE PREPARATION FROM *FRAGARIA VESCA* (L.) WITH THE ANTICOAGULANT ACTIVITY ON HUMAN BLOOD PLASMA**I. Pawlaczyk^{1,2}, O. Lisowska¹, J. Turjan³, J. Kozák³, P. Capek³, R. Gancarz^{1,2}

¹Division of Medicinal Chemistry and Microbiology, Wrocław University of Technology, ul. Łukasiewicza 2, 50-371 Wrocław, Poland

²Regional Specialist Hospital in Wrocław, Research and Development Centre, Kamińskiego 73a, 51-124 Wrocław, Poland

³Center for Glycomics, Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dubrávská cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovakia, chemtur@savba.sk

Wild Strawberry (*Fragaria vesca* L.) is very known medicinal plant from Rosaceae family. It is widely distributed mainly throughout the northern hemisphere. Its fruits contain many pharmaceutically active compounds which showed many biological effects, e.g. anti-carcinogenic activity, anti-thrombotic effects, they can increase the serum antioxidant capacity in humans, etc. [1]. Similarly, strawberry leaves were shown to be a source of bioactive compounds with potentially beneficial biological effects, however, they have been largely overlooked by researchers up to now. Apart from reports on the use of wild strawberry leaves in traditional medicine for the treatment of several diseases [2], scientific reports of its effects on biological systems are lacking.

The aim of presented work was to isolate polysaccharide-phenolic complexes from dried leaves of *Fragaria* using different isolation procedures in order to find the most active anticoagulant compounds from this plant material [3]. The anticoagulant activities of glucoconjugates isolated from strawberry leaves by different ways were tested *in vitro* on human blood plasma with aPTT, PT and TT tests. To get more information about the structure-activity relationship, *Fragaria* glycoconjugates were characterized from chemical point of view. It has been found that individual conjugates differed in carbohydrate, phenolics and uronic acid contents, and in monosaccharide composition of their carbohydrate parts.

Studies were supported by European Regional Development Fund and the Polish Government (Operational Programme - Innovative Economy) Grant WROVASC (Integrated Cardiovascular Centre, 2007-2013, VEGA Grant No. 2/0017/11, and this

contribution is also the result of the project implementation: Centre of excellence for white-green biotechnology, ITMS 26220120054, supported by the Research & Development Operational Programme funded by the ERDF.

[1] Cao, G. et al., J. Nutr. 1998, 128, 2383–2390.

[2] Jaric, S. et al., J. Ethnopharmacol., 2007, 111, 160–

175.

[3] Pawlaczyk I. et al., Patent Application PL 380 474, 2006.

POSTERY - SEKCIA 4 VYUČOVANIE A HISTÓRIA CHÉMIE

4Po01 IMPLEMENTACE STUDIJNÍHO PROGRAMU „EUROPEAN MASTER IN MEMBRANE ENGINEERING“ NA VŠCHT PRAHA

Karel Bouzek¹, Vlastimil Fíla¹, Ivona Sedlářová¹,
Jana Jiroušová¹

¹VŠCHT Praha, Ústav anorganické technologie,
Technická 5, 166 28 Praha 6, Karel.Bouzek@vscht.cz,
Ivona.Sedlarova@vscht.cz

Moderní technologické procesy, perspektivní z hlediska trvale udržitelného rozvoje společnosti, se vyznačují narůstající interdisciplinarností a požadavky na intenzivní výzkum a vývoj. Další charakteristikou této skupiny technologií je častá absence odpovídajícího vzdělávání nových odborníků nezbytného pro jejich další rozvoj a zejména pak jejich rozšíření do praxe. K této kategorii technologií rovněž patří membránové procesy. S cílem zabezpečit jejich odpovídající rozvoj a rychlé rozšíření do praxe byl navržen a vypracován nový magisterský studijní program využívající rozsáhlých mezinárodních kontaktů VŠCHT Praha v rámci evropských výzkumných a vzdělávacích struktur. Tento program zajišťovaný konsorciem šesti evropských univerzit byl úspěšně předložen ke schválení v rámci programu Erasmus Mundus. Realizace programu mezinárodních sítí univerzit byla motivována zejména snahou využít synergického efektu vzájemné kombinace silných stránek jednotlivých členů konsorcia, poskytnutí celoevropské garance získaného vzdělání a otevření tohoto studia vynikajícím studentům z celého světa, zajištěním finanční podpory poskytované studentům Evropskou komisí. V rámci tohoto příspěvku je prezentována struktura schváleného studijního programu, role VŠCHT Praha v něm a problémy spojené s jeho implementací do praxe, která je však v důsledku

dosud poměrně malých zkušeností s tímto typem projektů provázena řadou administrativních komplikací. Jejich úspěšné zvládnutí představuje nezbytnou podmínku další internacionalizace vzdělávání na VŠCHT Praha.

Autoři děkují za finanční podporu Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy České republiky v rámci centralizovaného projektu Rozvojových programů MŠMT na rok 2011, číslo projektu CSM 16.

4Po02 GEOMETRICKÉ PARAMETRY A KONFORMACE V DNA

Petr Čech¹, Daniel Svozil¹, Filip Lankas²

¹Vysoká škola chemicko-technologická v Praze,
Technická 5, 166 28 Praha 6, petr.cech@vscht.cz
²Ústav organické chemie a biochemie, Flemingovo
nám. 2, 166 10 Praha 6, filip.lankas@uochb.cas.cz

Cílem prezentovaného projektu je studium konformačního chování deoxyribonukleové kyseliny (DNA). Konformace DNA lze charakterizovat buď hodnotami torzních úhlů na cukr-fosfátové páteři, nebo tzv. báзовými parametry popisujícími vzájemné postavení bází v páru či bází v tzv. dinukleotidovém kroku. Geometrie cukr-fosfátové páteře a báзовé parametry dinukleotidů pocházejících z 1458 vybraných krystalových struktur protein-DNA komplexů byly vypočteny programem 3DNA [1] a poté byly studovány metodami statistické analýzy. Byly nalezeny jejich typické hodnoty a rozsahy pro kanonické BI, BII, AI a AII konformery, stejně tak jako pro další netypické konformace. Ultimátním cílem prezentovaného projektu je pak charakterizace vzájemných vztahů mezi torzními úhly a báзовými parametry.

Tento projekt vzniká za podpory výzkumných záměrů MSM 6046137306 a MSM 6046137302.

[1] Xiang-Jun Lu & Wilma K. Olson (2003). "3DNA: a software package for the analysis, rebuilding and visualization of three-dimensional nucleic acid structures", Nucleic Acids. Res., 31(17), 5108-5121.

4Po03 NOVÁ GENERACE ELEKTRONICKÝCH SLOVNÍKŮ

Petr Čech¹, Miroslav Šimek, Jiří Znamenáček

¹*Vysoká škola chemicko-technologická,
Petr.Cech@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 „KUCHAŘ, M. Farmaceutický slovník. 1st ed. Praha : VŠCHT Praha, 2011“, v jehož případě elektronická podoba dokonce již předchází podobu tištěnou. Použitý anotační mechanismus umožňuje generování elektronické verze slovníku z běžných textových dokumentů přímo vytvářených autory a jeho automatické obohacení o prvky nadstandardních webových technologií. Díky novým interaktivním prvkům tak jasně ukazuje, v čem mohou elektronické publikace doplnit (a pro někoho možná i zcela nahradit) standardní tištěné.

[1] <http://vydavatelstvi.vscht.cz>

4Po04 PHYSICAL CHEMISTRY – ENGLISH LABORATORY TEACHING

Jan Hrbáč¹, Martina Bancířová¹,

¹*Department of Physical Chemistry, Faculty of Science, Palacký University, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, Czech Republic,
martina.bancirova@upol.cz*

The aim of this project was to prepare the English multimedial presentation of Physical Chemistry Practicals and Experimental Chemical Methods. The laboratory practicals are aimed at fundamental knowledge in physical chemistry (Latent states and their properties, Chemical thermodynamics, Heterogeneous equilibrium, Chemical equilibrium, Electrochemistry, Chemical kinetics, Colloid chemistry, The interaction of matter and radiation). The laboratory practice in Experimental Chemical Methods is focused on acquirement of basic laboratory methods in inorganic and organic synthesis, familiarization and mastering

elementary physical and chemical methods, which are particularly used for analysis of basic parameters of environment quality (synthesis and purification of inorganic compounds, coordination compounds and selected organic compounds, esterification, multistep organic synthesis, isolation of organic compounds from natural materials, spectroscopy in qualitative and quantitative analysis of inorganic and organic compounds, application of basic physical-chemical methods for environmental pollution analysis, thin layer chromatography electrophoresis, gas chromatography, potentiometric neutralization titration, capture and determination of nitrogen oxides in the atmosphere). This presentation can be used also for the foreign students in LLP (Lifelong Learning Programme) – Erasmus.

Supported by grant FRVS 2383/2011

4Po05 POSSIBILITIES OF DIFFUSE REFLECTANCE SPECTRA EMPLOYMENT FOR SOLID MATERIALS - NEW LABORATORY EXERCISE (MOŽNOSTI VYUŽITÍ DIFUSNĚ REFLEKTANČNÍCH SPEKTER PEVNÝCH MATERIÁLŮ - NOVÁ LABORATORNÍ ÚLOHA)

Peter Prieceľ¹, Libor Čapek¹, Šárka Botková¹

¹*Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentská 573, Pardubice, peter.prieceľ@gmail.com*

Nowadays, there is increasing pressure on the amount of knowledge and skills required from the graduate students. Masters with instrumental techniques experience are demanded by industry and R&D facilities.

For the study of solid materials, characterization by instrumental techniques can reveal various aspects of the structure of catalysts, polymers, adsorbents, thin films, dyes or various insoluble bulk chemicals. One of the techniques employed is UV-Vis spectroscopy, every now and then coupled with NIR. However, many solid materials do not allow direct absorbance or transmittance measurements, because the light cannot penetrate the material. Here, diffuse reflectance accessory can be of great benefit and one can measure spectra very similar to those of liquid solutions. UV-Vis spectroscopy is technique relatively simple to work with, although fairly complex in theory.

Thus, our goal was to introduce new laboratory exercise for master students at the Department of

Physical Chemistry, University of Pardubice, which would allow their interaction with modern UV-Vis spectrometer coupled with diffuse reflectance accessory for measurement of solid materials. Students passing this exercise should be able to prepare sample for measurement, handle the spectrometer and process measured data to the form of the publish-ready spectra, with its deconvolution (fitting) and literature discussion.

The authors gratefully thank the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (MSMT/1732/2011).

4Po06

INOVACE PROFESNÍ PŘÍPRAVY BUDOUČÍCH UČITELŮ CHEMIE

Marta Klečková¹, Josef Husárek,¹ Jana Prášilová¹

¹*Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, marta.kleckova@upol.cz*

Vysokoškolskou přípravu učitelů chemie tvoří dvě základní složky – odborná příprava v oboru chemie a profesní příprava na učitelské povolání s pedagogicko-psychologickými předměty, oborovou didaktikou a pedagogickou praxí [1]. Profesní část přípravy je často opomíjena - učitelé jsou velmi dobře připravováni po odborné stránce v oboru chemie, ale mají minimální pedagogické zkušenosti, neboť jim chybí více kontaktů s žáky během VŠ studia. Inovaci VŠ přípravy učitelů si vyžádaly v současnosti probíhající změny v českém školství, zejména se jedná o výuku na ZŠ a SŠ dle rámcových vzdělávacích programů (RVP), které vyžadují od učitelů přírodovědných předmětů zcela nový přístup k přírodovědnému vzdělávání [2,3].

Do výuky budoucích učitelů chemie na Přírodovědecké fakultě UP v Olomouci jsou v rámci zkvalitnění jejich profesní přípravy nově zapojováni odborníci z jiných vysokých škol, např. UK Praha, OU Ostrava, UHK Hradec Králové i zkušení učitelé středních škol. Byly výrazně posíleny aktivity VŠ studentů umožňující budoucím učitelům chemie bezprostřední kontakt s žáky ZŠ a SŠ, např. řízení žákovských projektů, realizace chemické olympiády a vedení laboratorních cvičení přímo na školách, organizování exkurzí v laboratořích PřF UP pro žáky ZŠ a SŠ, příprava internetové soutěže L@byrint chemie, prezentace chemických experimentů na Jarmarku vědy a umění

v Uherském Hradišti a Přírodovědném jarmarku v Olomouci.

Poděkování za finanční podporu EU projektu OPVK CZ.1.07/2.2.00/15.0324 „Inovace profesní přípravy budoucích učitelů chemie“, příspěvek prezentuje průběžné výsledky projektu.

- [1] Jan Průcha: Moderní pedagogika. Praha, Portál 2002.
- [2] Tomáš Janík a kol.: Nástroje pro monitoring a evaluaci kvality výuky a kurikula. Brno, Paido 2010.
- [3] MŠMT dokumenty - školská reforma. [on-line] Dostupné z: <http://www.msmt.cz/vzdelavani/skolskareforma> [cit. 7. 7. 2011]

4Po07

PROJEKT INCHIZIP NA UNIVERZITĚ PARDUBICE

Jiří Palarčík, Miloslav Slezák

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

Projekt „Inovace výuky chemického a procesního inženýrství a ochrany životního prostředí na FCHT Univerzity Pardubice“ (INCHIZIP) je zaměřen na inovaci předmětů vyučovaných a zajišťovaných akademickými pracovníky Ústavu environmentálního inženýrství (ÚEnviCHI) na FCHT Univerzity Pardubice. Jedná se o předměty vyučované jak v základním kurzu bakalářského studia fakulty, tak i ve specializovaném navazujícím magisterském studiu. Cílem projektu je postihnout pro oblasti chemického a procesního inženýrství a životního prostředí (ŽP) dopady trvalých technických inovací a překotný vývoj legislativy v oblasti ŽP. Projekt je realizován ve čtyřech klíčových aktivitách.

V rámci klíčových aktivit **KA1** „Inovace teoretické a praktické složky výuky vybraných předmětů z oblasti životního prostředí“ a **KA2** „Inovace teoretické a praktické složky výuky vybraných chemicko-inženýrských předmětů“ jsou převážně aktualizovány či vytvářeny nové přednášky, semináře a laboratorní úlohy. Pro poznání reálného prostředí byla navázána spolupráce s partnery Empla AG s.r.o. a Tebodín Czech Republic s.r.o., u kterých studenti absolvují stáže a seznamují se s praktickými poznatky z oblasti životního prostředí a z prostředí chemicko-inženýrské projekční firmy. Klíčová aktivita **KA3** „Zvyšování odborné a pedagogické kvalifikace akademických pracovníků“ je zaměřena hlavně na oblast informačních technologií, jazykových kurzů a odborných školení, klíčová aktivita **KA4** je pak

orientována na „Propagaci projektových studijních oborů pro středoškolské studenty“.

Příspěvek byl realizován za finanční podpory MŠMT v rámci projektu OP VK č. CZ.1.07/2.2.00/15.0353.

POSTERY - SEKCIA 5
POTRAVINÁRSTVO, ŽIVOTNÉ
PROSTREDIE A BIOTECHNOLÓGIA

5Po01
THE ASSESSMENT OF SUSCEPTIBILITY
OF SULFONAMIDE DRUGS TO
BIODEGRADATION IN
ENVIRONMENTAL SAMPLES

Wojciech Baran¹, Ewa Adamek¹, Justyna Ziemiańska², Andrzej Makowski¹, Andrzej Sobczak^{1,2}

¹ Silesian Medical University, Department of General and Analytical Chemistry, Jagiellońska 4, 41-200 Sosnowiec, Poland; ewa.adamek@wp.pl

² Institute of Occupational Medicine and Environmental Health, Kościelna 13, 41-200 Sosnowiec, Poland

Sulfonamide drugs enter the environment in different ways, e.g. through wastewater, creating the potential risk of the generation of drug resistant strains of microorganisms. This risk increases when drugs are resistant to degradation and remain in the environment for a long time. For these reasons it is particularly important to know biodegradability of sulfa drugs since the literature data on this subject are often contradictory [1].

In our study the estimation of susceptibility of four sulfonamides (sulfanilamide, sulfadiazine, sulfathiazole and sulfamethoxazole) was carried out under aerobic conditions. The mixture of these compounds was added:

- directly to environmental samples or natural wastewater samples (from different sources),
- to synthetic wastewater containing inoculum from natural sources.

In the study the effects of:

- oxygen conditions,
- the availability of light ($\lambda > 400$ nm),
- pH of the solution,
- a season of sampling of inoculum,
- earlier, 40-days adaptation of inoculum to sulfanilamide.

The degree of sulfonamides (SNs) degradation was determined based on the decrease in their concentration within 28 days, using HPLC method.

The effective biodegradation of SNs was observed in 3 samples of sulfanilamide, 25 samples of sulfadiazine, 29 samples of sulfathiazole and 1 sample of sulfamethoxazole among the all investigated 86 samples. It was found that the biodegradation course of SNs differ significantly from the results presented in the literature. Moreover, the dynamics of this process depends mainly on the type of sulfonamide, the origin of inoculum and the season of sampling.

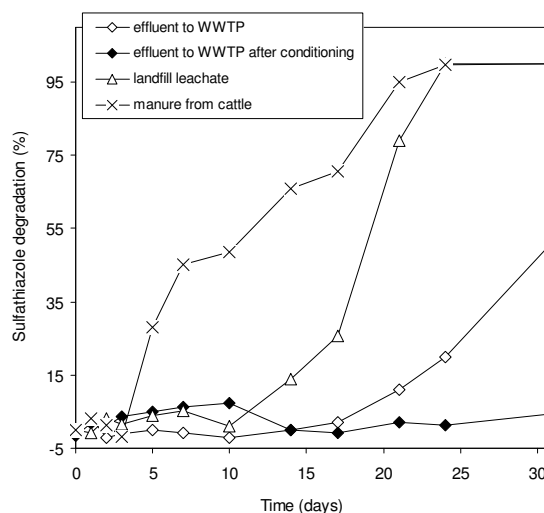


Fig. 1 Degradation dynamics of sulfathiazole in the synthetic wastewater containing different inoculum

[1] Kathryn M. Onesios, Jim T. Yu, Edward J. Bouwer: Biodegradation, 20 (2009) 441–466.

5Po02**2,2,2-TRIFLUOROETHYL α -D-GALACTOPYRANOSIDE: NEW SUBSTRATE FOR ENZYME CATALYZED TRANSGLYCOSYLATIONS.**

Miroslav Belák¹, Jana Dudíková¹, Mária Mastihubová¹, Vladimír Mastihuba¹

¹Slovenská akadémia vied, Chemický ústav, Centrum glykomiky, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava

2,2,2-trifluoroethyl α -D-galactopyranoside was employed for production of oligosaccharides by α -galactosidase in cell walls of yeast *Cryptococcus laurentii*. This α -galactosidase has (1 \rightarrow 6) selectivity and produced di- and tri- α -(1 \rightarrow 6)-D-galactopyranosides. After 8 hours of incubation, 14,6% of galactobioside and 2,6% of galactotrioside were formed. The performance of the substrate was compared to standard transgalactosylations with commonly used 4-nitrophenyl α -D-galactopyranoside. Its lower solubility in water and higher rate of hydrolysis affected the yield of the reaction. Only 5,5% (after 3 hours) of galactobioside and 1,9% (after 6 hours) of galactotrioside were produced. According to these results, 2,2,2-trifluoroethyl α -D-galactopyranoside could represent an alternative substrate for enzymatic transgalactosylations.

5Po03**ODSTRAŇOVÁNÍ MĚDI (II) POMOCÍ OXYHUMOLITU Z ODPADNÍCH VOD OBSAHUJÍCÍCH FOSFÁTY**

Hana Kohutová¹, Bruno Kostura¹, Juraj Leško¹

¹VŠB-Technická univerzita Ostrava, 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava- Poruba, ČR, bruno.kostura@vsb.cz

Oxyhumolity jsou běžně používány jako sorbenty iontů těžkých kovů (TK). V našich sorpčních experimentech se ovšem ukázalo, že kromě TK se sorbují také přítomné fosfáty. V práci byly posuzovány jednak faktory ovlivňující adsorpční účinnost neupraveného oxyhumolitu (pH roztoku, koncentrace Cu²⁺, přítomnost fosfátu, doba sorpce), dále pak byla sledována sorpční účinnost izolovaných huminových kyselin pro měď a fosfát. Huminové kyseliny byly separovány z oxyhumolitu alkalickou extrakcí. Množství mědi sorbované neupraveným oxyhumolitem lineárně roste s rostoucím pH, zatímco adsorpce fosfátů na pH nezávisí. Jako nejvhodnější se ukázal interval hodnot pH 3,6 – 3,9 ve kterém byla účinnost odstranění Cu²⁺ 95% a fosforu jen 13,1%. Maximální sorpční kapacita mědi při pH 3,9 byla 1,6059 mmol g⁻¹. Průběh sorpce mědi i fosfátu lze charakterizovat Freundlichovou izotermou, sorpční rovnováha se ustavuje již po 20 minutách. Adsorpční účinnost izolovaných

HA je pro Cu²⁺ 97,0%, pro fosfát je menší než 0,1%. Zjištěné výsledky byly použity při dvoustupňovém čištění vody obsahující ionty mědi i fosfátů. K sorpci Cu²⁺ byly použity HA, k následnému získání fosfátu [1] pak komerční kalcinovaný hydrotalcit Mg-Al-CO₃.

Práce byla realizována díky finanční podpoře Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR (výzkumný záměr MSM č. 6198910016) a specifického výzkumu (Transportní procesy ve vícefázových systémech SP č.2011/41).

[1] Kostura, B., Matýsek, D., Leško, J.: Mechanizmy sorpce fosfátů z vodných roztoků kalcinovanou formou Mg-Al-CO₃ hydrotalcitu. Chemické Listy (přijato, březen 2011)

5Po04**OXIDATION OF FAT COMPONENT OF FOOD DURING MICROWAVE HEATING**

Ivana Kolesárová¹, Stanislav Sekretár¹, Štefan Schmidt¹, Jarmila Hlásniková¹, Lenka Vrbiková¹

¹Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, ivana.kolesarova@stuba.sk

In this work we investigated the oxidative stability of two model rapeseed oils at 20 min microwave heating with and without addition of antioxidant supplement formulations on the basis of rosemary (AOF). First one (RO2) - bleached by the addition of 80 kg and second one (RO1) - bleached by the addition 160 kg of bleaching earth to 14 t of oil. Analogous samples of oils without tocopherols (ROT2, ROT1) were also tested. At the same time we examined the effects of tocopherols and chlorophyll contents on the oxidation stability of oils. Rapeseed oil RO2 was the most stable. The stability of oils after microwave heating (observed from their p-anisidine values) decreased in the order RO2 > RO1 > ROT2 > ROT1. After the addition of antioxidant formulation AOF the stability was significantly improved and was in order ROT1 > RO1 > ROT2 > RO2. We observed the microwave heating accelerates the lipid oxidation 3-4 times faster than conventional one. To maintain adequate oxidative stability of oils it was necessary to add at least 0.1% of AOF, which is higher amount than is usually added in the stabilization of fats during storage [1].

Thanks: This work was performed with support grant VEGA 1/0746/08 and grant to support young researchers 6414.

[1] Štefan Schmidt: Antioxidanty a oxidačné zmeny tukov v potravinách. Slovenská technická univerzita v Bratislave. Bratislava 2010, 220 s.

5Po05
EMULZNÍ ENKAPSULACE
PROBIOTICKÝCH MIKROORGANISMŮ

Ivana Lisová, Šárka Horáčková, Milada Plocková

Ústav technologie mléka a tuků, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika

Jednou z možností jak zvýšit životaschopnost probiotických mikroorganismů při průchodu trávicím traktem i ve výrobcích je jejich enkapsulace. V práci byly pomocí emulzní enkapsulace s využitím mléčné bílkovinné matrice připraveny mikrokapsle s obsahem komerčních probiotických kmenů *Lactobacillus casei* Lafti L-26 a *Bifidobacterium animalis* subsp. *lactis* Bb12. Mikrokapsle byly charakterizovány z hlediska velikosti a počtu enkapsulovaných buněk. Byl prokázán pozitivní vliv zvýšené rychlosti míchání a přídavku 0,5 % hm. lecithinu na zmenšení velikosti mikrokapslí. Při zvýšení frekvence otáčení míchadla z 500 min⁻¹ na 1200 min⁻¹ došlo ke zmenšení průměrné velikosti mikrokapslí s přídavkem 0,5 % hm. lecithinu ze 78,5 ± 2,7 μm na 38,8 ± 3,2 μm. Přídavek 0,5 % hm. lecithinu vedl ke snížení průměrné velikosti mikrokapslí při frekvenci otáčení míchadla 1200 min⁻¹ z 192,9 ± 24,3 μm na 38,8 ± 3,2 μm. Při porovnání životaschopnosti enkapsulovaných a neenkapsulovaných buněk v simulovaném prostředí gastrointestinálního traktu (žaludek a tenké střevo) byl prokázán ochranný účinek mikrokapslí vůči nízkému pH, obsahu žlučových solí a trávicím enzymům. U enkapsulovaných buněk došlo k poklesu denzity přibližně o dva řády, u neenkapsulovaných asi o čtyři řády.

Práce byla podpořena grantem Ministerstva zemědělství ČR z programu VAK 2011, Udržitelný rozvoj agrárního sektoru, č. grantu QI 111B053.

5Po06
HPLC STUDY AND PROTEINASE
INHIBITION ACTIVITIES OF HOPE AND
HOPE COMPONENTS.

Tibor Maliar^{b*}, Mária Maliarová^a, Jana Girmanová^a, Vladimír Fázik^a

^aDepartment of Chemistry, University of SS. Cyril and Methodius, Faculty of Natural Sciences, Námestie Jozefa Herdu 2, SK – 917 01 Trnava, Slovakia,

^bDepartment of Biotechnology, University of SS. Cyril and Methodius, Faculty of Natural Sciences, Námestie Jozefa Herdu 2, SK – 917 01 Trnava, Slovakia.

The plant of hope, *Humulus lupulus* L., is well-known throughout the world as a raw material for the brewing industry. Beside this, it is attractive for other drink products and nutraceuticals due to content of interesting, biologically active compounds. The main structural classes of chemical compound, identified from hop mature, include terpenes, bitter acids and prenylated chalcones. Hop is also rich for flavonol glycosides derived from kaempferol and quercetin.

The first part of our experiment is devoted to the selection of optimal conditions for the separation of major flavonoids which were studied on the short RP columns of 30 – 75 mm length filed with hybrid types of sorbents. Work continues with the selection of conditions of preparing samples of *Humulus lupulus* L. which were applied on the studied hop species. In the frame of this study were analysed several varieties of hope, harvested during year 2009. HPLC analysis was done immediately after hydrolysis carried out under optimal conditions. The content of quercetin has been found in the range from 489,5 ± 9,7 to 865,4 ± 4,1 μg/g and for kaempferol from 217 ± 7,6 to 402,4 ± 8,4 μg/g of hope dry mater.

The second part of the work was dedicated to proteinase inhibition activities of the selected standards of hope – quercetin, kaempferol, xanthohumol, bitter acids and standardized extracts of various varieties of hope and Oswald clones to selected proteinase set via microplate technique. All mentioned entities were tested as inhibitors of trypsin and chymotrypsin (digestion and pancreatic disorders) thrombin, plasmin (haemocoagulation and fibrinolysis disorders), urokinase (metastasis progression) and finally elastase, cathepsin B (inflammation, arthritis, and rheumatism). Most of the tested samples expressed significant inhibition activities and is there an assumption of the minimally preventive effect towards mentioned pathologies.

Keywords: hope, *Humulus lupulus* L, RP-HPLC, flavonoids, chalcones, bitter acids, proteinases, inhibition activities

This paper is supported by grant APVV No.: VMSP-II-0021-09

- [1] Zanolì, P., Zavatti, M. : *J. Ethnopharmacol.*, 116, 2008, s. 383 – 396.
- [2] Hertog, M. G. L., Hollman, P. C. H., Venema, D. P.: *J. Agri.c. Food. Chem.*, 40, 1992, s. 1591 – 1598.
- [3] Leung D., Abbenante, G., Fairlie, D.P. (2000) Protease inhibitors: current status and future prospects. *J. Med. Chem.* 43, 305-341.

5Po07

ISOLACE KOLAGENNÍCH PRODUKTŮ Z HOVĚZÍCH ŠLACH

Pavel Mokrejš¹, Dagmar Janáčová², Vladimír Vašek²

¹Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Fakulta technologická, Ústav inženýrství polymerů, nám. TGM 275, 762 72 Zlín, mokrejs@ft.utb.cz

²Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Fakulta aplikované informatiky, Ústav automatisace a řídicí techniky, Nad Stráněmi 4511, 760 05 Zlín, janacova@fai.utb.cz

Jatky a výrobní masa produkují nezanedbatelná množství odpadů. Největší část se v současnosti využívá v energetice [1]; další část se zpracovává v ropném průmyslu, na výrobu paliv, krmiv pro zvířata či hydrolyzáty [2, 3]. Hovězí šlachy jsou vedlejším produktem masné výroby a obsahují v sušině až 95 % bílkovin. Po odtučnění šlach lze řízenou extrakcí izolovat rozpustný kolagen, želatinu a kolagenní hydrolyzáty. V prvním kroku se smísením přečištěných šlach s 0,1 mol/l CH₃COOH v poměru 1:25 po 48 h při 25 °C vyextrahuje malé množství rozpustného kolagenu, který se oddělí filtrací. Ve druhém kroku se šlachy smísí s 0,05-0,13 mol/l CH₃COOH v poměru 1:5 a při 70-90 °C se 2 h extrahuje želatina (výťažek 24-86 %). Podle podmínek extrakce je pevnost želatinových gelů 210-400 Bloom, obsah popelovin odpovídá požadavkům potravinářských želatin. Ve třetím kroku se zbylý podíl šlach po extrakci rozpustného kolagenu a želatiny smísí s vodou v poměru 1:5 a za přítomnosti 1 % enzymu se inkubací při 50 °C za 5 h připraví kolagenní hydrolyzáty. Celou technologii lze charakterizovat jako bezodpadovou, proces probíhá za mírných podmínek. Rozpustný kolagen a kolagenní hydrolyzáty lze použít např. v kosmetice, v potravinářství či farmacii; želatinu pak ve farmacii a v potravinářství.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR MSM 7088352102.

- [1] Sharrock, P. et al. Hazardous animal waste carcasses transformation into slow release

fertilizers. *J. Hazard. Mater.* 2009, 167: 119-123.

- [2] Jeng, A. et al. Meat and bone meal as nitrogen fertilizer to cereals in Norway. *Agr. Food Sci.* 2004, 13: 268-275.
- [3] Webster, J. D. et al. Protein hydrolysates from meat industry by-products. *Meat Sci.* 1982, 7: 147-157.

5Po08

FYTOTOXICITA BANSKÝCH VÔD A ZMESÍ KOVŮ PO REMEDIÁCIÍ VLÁKNITÝMI MIKROSKOPICKÝMI HUBAMI *Aspergillus niger*

Marianna Molnárová¹, Ľubica Janovová², Alexandra Šimonovičová², Agáta Fargašová¹

¹Katedra ekotoxikológie a fyziotaktiky, Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského v Bratislave, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, molnarova@fns.uniba.sk, fargasova@fns.uniba.sk

²Katedra pedológie, Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského v Bratislave, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, lubica.janovova@fns.uniba.sk, alexandra.simonovicova@fns.uniba.sk

Cieľom práce je posúdenie fyto toxického účinku vzoriek banskej vody (BV) a zmesi kovov (Z) (Cd, Cr, Cu, Ni, Pb, Zn) po remediácii, na ktorú sa použili mycéliá mikromycét *Aspergillus niger* (An1 kmeň z Gabčíkova, An3 z Pezinka-Kolársky vrch) [1]. Fytotoxicita sa hodnotila na horčici bielej (*S. alba*) ako: (1) inhibícia rastu po 72 h kultivácie semien *S. alba* v tme; (2) hladiny fotosyntetických pigmentov (chlorofylu a, b, karotenoidov) po 7 dňoch kultivácie (3 dni v tme a 4 dni v režime deň/noc); (3) stanovenie sušiny a akumulácie kovov po 7 dňoch kultivácie (3 dni tma + 4 dni denný režim). K štatisticky významnej inhibícii rastu koreňov a výhonkov dochádzalo vo všetkých vzorkách okrem rastu semenáčikov v BV. Fotosyntetické pigmenty významne inhibovala zmes kovov Z a hladinu karotenoidov aj vzorka Z+An3. Vyššie percento sušiny výhonkov ako aj výrazná akumulácia Cd sa potvrdila pri zmesi kovov Z. Pb sa vo zvýšenom množstve kumulovalo v koreňoch zo vzoriek BV+Z, Z, BV+Z+An1, Z+An1 a Z+An3. Väčší obsah Ni sme pozorovali v semenáčikoch zo vzoriek po remediácii. Kým Cr(VI) sa v sušine rastlín zo vzoriek nekumuloval, Zn sa významne akumuloval najmä v koreňoch a výhonkoch kultivovaných v roztokoch BV+An3, BV+Z+An1 a BV+Z+An3.

Projekt vznikol za podpory grantov MŠ SR KEGA č. 3/7234/09 a VEGA 1/0156/11.

- [1] Ľubica Janovová, Alexandra Šimonovičová, Marianna Molnárová, Agáta Fargašová: Využitie

vláknitých mikroskopických húb v environmentálnych biotechnológiách a bioremediáciách. *Vodárenská biologie* 2008, 29-30. ledna 2008, Praha, Česká republika, Říhová Ambrožová J. (Ed.), str. 130-135.

5Po09**STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF DOC FROM FLÁJE DAM TRIBUTARY**

František Novák¹, Martina Šestauberová¹, Richard Hrabal², Jana Špirochová², Miroslav Krtička³

¹Biology Centre AS CR, v.v.i., Na Sádkách 7, 370 05 České Budějovice, Czech Republic, novakf@upb.cas.cz
²Inst. Chemical Technology, 166 28 Prague 6 – Dejvice, Czech Republic; 3Forestry Game Manag. Res. Inst., 156 04 Prague 5 – Zbraslav, Czech Republic

Increased content of dissolved organic carbon (DOC), especially of humic substances (HS), negatively affects water quality from upland catchments. To find the cause of increased DOC content in the Fláje reservoir (North Bohemia) for drinking water, we isolated HS by standard method [1] from the water stream Rašeliník (left-hand tributary) and characterized it by solution-state ¹³C NMR, FTIR, UV/VIS spectroscopy and gel permeation chromatography.

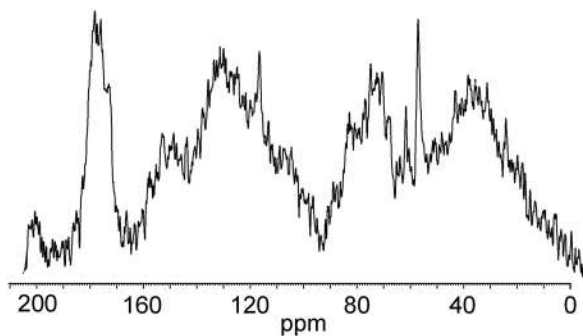


Fig. 1 ¹³C NMR spectrum of HS from the stream water.

Isolated HS were almost free (< 3 %) from high-molecular fraction. Their weight-average molecular weight of 7.9 kDa and A₄₆₅/A₆₆₅ ratio of 13.8 corresponded or were close to values typical for fulvic acids. Also comparing with FTIR spectra library has shown that isolated HS have a structure very similar to fulvic acids originating in young layers of peat (score 98 %). Aromaticity determined from the ¹³C NMR spectrum as the ratio of integrated intensities I(106 – 165 ppm)/I(0 – 165 ppm) reached 41.6 %. Proportion of carboxyl carbons was 13.6 %.

Results of structural characterization of humic substances from DOC suggest that the export of

fulvic acids from relatively young peat layers is the probable cause of DOC increase in the inflow.

Grant dedication – This work was supported by the project Ziel3/Cíl3 ČR-Sasko, No. 100018967.

[1] Malcolm R. L., in: Humic substances in the aquatic and terrestrial environment. Allard B., Borén H., Grimvall A. (eds) *Lecture Notes in Earth Sciences*, Springer Verlag, New York, 33: 9 – 36 (1991)

5Po10**SORPTION OPTIMIZATION OF SENSORIC ACTIVE COMPOUNDS FROM FLAX SEED OIL**

Daniela Chmelová¹, Miroslav Ondrejovič^{1,2}, Tibor Maliar¹

¹ Department of Biotechnology, Faculty of Natural Sciences, University of Cyril and Methodius, Nám. J. Herdu 2, 917 01 Trnava

² Food Research Institute, Biocentrum, Kostolná 5, 900 01 Modra

Flax seed oil is an important and perspective source of ω-3 polyunsaturated fatty acids, but this oil is not accessible as nutraceutical additive for low stability and concomitant undesired coloured compounds in specific cases. The aim of this study was to optimize of independent variables /solid to liquid ratio, temperature and time/ to output parameters of the bleaching process of flax seed oil via RSM approach. The following product quality parameters such as crude oil colour expressed as OD_{490nm}, acid and peroxide value of oil were chosen as dependent variables. After calculating the optimal values of the bleaching process, the validation analysis was carried out and it was found out that the predicted and experimentally verified dependent variables were in agreement with the optimal parameters.

This paper was supported by the grant from the Slovak Research and Development Agency, grant No.: VMSP-P-0149-09.

5Po11**ČIŠTĚNÍ ODPADNÍCH VOD Z VÝROBY NITROGLYCERINU**

Jiří Palarčík, Vítězslav Šimon

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

Při výrobě nitroglycerinu vzniká velké množství odpadních vod, které obsahují značné množství organických kontaminantů, převážně nitroesterů. Tyto látky jsou v životním prostředí problematické nejen z hlediska jejich toxicity, ale

také pro jejich obtížnou biologickou odbouratelnost. V literatuře je popsána řada metod, které jsou použitelné pro odstraňování těchto kontaminantů. Jedná se například o Fentonovu oxidaci, adsorpci a redukci pomocí drobnozrnného nulavalentního železa. [1, 2]

Experimentálně byly odzkoušeny tři metody. Při Fentonově reakci byl sledován vliv poměru Fe^{2+} iontů a H_2O_2 na účinnost odstranění nitroesterů. Další použitou metodou byla UV / H_2O_2 fotolýza u které byl sledován vliv přídavku peroxidu vodíku. Poslední odzkoušenou metodou byla ozonizace.

Ze tří experimentálně odzkoušených metod bylo nejvyššího účinku odstranění nitroesterů dosaženo Fentonovou oxidací.

Tato práce vznikla za podpory výzkumného záměru č. MSM 0021627502.

[1] OH S.-Y., CHA D. K., CHIU P.C., KIM B.J., KIM D.W.: *Removal of TNT and heterocyclic nitramines in wastewater using elemental iron and H_2O_2* . Department of Civil and Environmental Engineering, University of Delaware, DE, USA. Annual Technical Exhibition & Conference, 75th, Chicago, IL, United States, 2002.

[2] DOW J., STACY J. R.: *Treatment of nitroglycerin wastewater with activated carbon*. Indian Head Div., Nav. Surf. Warf. Cent., Indian Head, MD, USA. International Annual Conference of ICT, 1992.

5Po12 MATEMATICKÉ MODELOVÁNÍ HAVARIJNÍHO ÚNIKU AMONIÁKU

Pavel Platoš¹, Stanislav Bartusek¹, Petr Praus²

¹ VŠB-TU Ostrava, FMMI, Katedra ochrany životního prostředí v průmyslu, 17. listopadu 15/2172, 708 33 Ostrava, pavel.platos@vsb.cz, stanislav.bartusek@vsb.cz

² VŠB-TU Ostrava, FMMI, Katedra analytické chemie a zkoušení materiálů, 17. listopadu 15/2172, 708 33 Ostrava, petr.praus@vsb.cz

Současná doba prochází stále větším průmyslovým rozvojem, který s sebou přináší různá rizika. Mezi největší z nich patří rizika úniků nebezpečných látek. Největší riziko úniku nebezpečných látek představuje chemický a petrochemický průmysl [1]. V Moravskoslezském kraji je jedním z největších chemických podniků firma BC MCHZ Ostrava, kde denně dochází k přepravě, stáčení a skladování velkého množství nebezpečných látek, především amoniaku [2]. Příspěvek se zabývá problematikou matematického modelování prostředky CFD a jeho využití pro posouzení následku havarijního

úniku amoniaku na životní prostředí. Byla provedena simulace časově stacionárního úniku amoniaku a nalezena metodika matematického modelování. Metodika zahrnuje přípravu geometrie v propojení s GIS, přípravu výpočetní sítě, nastavení okrajových podmínek a fyzikálního modelu v programu FLUENT [3].

[1] Bartlová, I. *Nebezpečné látky I*. Ostrava, 2005, ISBN 86-86634-59-0

[2] Seinfeld, H. J.; Pandis, N. S. *Atmospheric chemistry and physics, From Air Pollution to Climate Change*, Wiley – Interscience, 1997, p. 140 – 162.

[3] Fluent Inc. *Fluent Users Guide, Tutorial Guide*. Lebanon, 2006.

5Po13 ODSTRAŇOVÁNÍ HALOGENIDŮ Z GENERÁTOROVÉHO PLYNU VZNIKLÉHO Z PLYŇOVÁNÍ BIOMASY

Gabriela Cabáková¹, Michal Jeremiáš^{1,2}, Michael Pohorelý^{1,2}

¹ Ústav energetiky, VŠCHT, Technická 5, 166 28 Praha 6

² Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i., Rozvojová 135, 165 02 Praha 6

Kontakt: email: pohorelm@vscht.cz, pohorely@icpf.cas.cz, tel.: 220390261

Generátorový plyn vzniká termochemickým zplyněním biomasy. Před dalším použitím, například v tepelných strojích, palivovém článku nebo při výrobě transportních paliv, je potřeba zbavit plyn nečistot, především prachu a dehtů, dále pak sloučenin síry, halogenidů a alkálií.

V praxi běžně užívané nízkoteplotní čištění spočívá ve vypírání plynu ve vodě nebo oleji. Přestože se jedná o materiálově nenáročnou a technologicky relativně dobře zvládnutou metodu, je pro některé aplikace nevhodná. Vlivem vypírání totiž dochází ke značnému poklesu teploty produkovaného plynu (< 80 °C).

Naproti tomu vysokoteplotní čištění je proces odstraňující nežádoucí látky z generátorového plynu při vyšších teplotách, konkrétně > 450 °C. K tomuto účelu se používají především cyklóny, svíčkové filtry, bariérové filtry a filtry s vrstvou zrnitého materiálu s adsorpčními či katalytickými schopnostmi.

Tato práce se bude věnovat především odstraňování halogenidů. Největší zastoupení má v generátorovém plynu chlorovodík. Bromovodík a fluorovodík jsou v plynu přítomny jen nepatrně. Halogenidy mají výrazné korozivní vlastnosti, působí jako katalytické jedy a jsou také zdrojem

emisí při následném spalování generátorového plynu.

Cílem práce je rešeršně zmapovat a následně navrhnout odstraňování halogenidů z plynu. Zkoumány budou rozličné vysokoteplotní adsorbenty a jejich vliv na množství halogenidů na výstupu ze zplyňovacího zařízení.

Tato práce vznikla díky finanční podpoře Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy na základě projektů: MSM č. 6046137304 a č. 21/2011 (specifický vysokoškolský výzkum) a projektu Technologické agentury České republiky BROZEN č. TA01020366.

5Po14

REACTIONS OF HYDROLYTIC ENZYMES IMMOBILIZED ON MAGNETITE-CHITOSAN PARTICLES

Kristyna Pospiskova¹, Ludmila Zajoncova¹, Ivo Safarik², Katerina Polakova³, Petr Tarkowski¹, Radek Zboril³, Marek Sebel¹

¹Department of Biochemistry, Faculty of Science, Palacky University, Slechtitelu 11, 783 71 Olomouc, Czech Republic, kristyna.pospiskova@seznam.cz

²Department of Nanobiotechnology, Institute of Nanobiology and Structural Biology of GCRC AS CR, Na Sadkach 7, 370 05 Ceske Budejovice, Czech Republic

³Regional Centre of Advanced Technologies and Materials, Slechtitelu 11, 783 71 Olomouc, Czech Republic

Immobilization of enzymes [1] on solid carriers is important in a large number of biotechnological applications leading in most of cases to their enhanced stability and resistance. Immobilized biocatalysts can be used repetitively mostly without lost of their activity. Especially magnetic materials represent significant group of immobilization supports offering fast and easy separation from the reaction mixture by applying an external magnetic field.

Microbial hydrolytic enzymes were immobilized on the synthetic nanoparticles of magnetite (Fe₃O₄) (produced by Regional Centre of Advanced Technologies and Materials, Olomouc) [2] and on the microparticles of chitosan with entrapped magnetite (produced by Department of Nanobiotechnology, Institute of Nanobiology and Structural Biology of GCRC AS CR, Ceske Budejovice) [3] using physical (adsorption) or chemical (carbodiimide, glutaraldehyde and epoxide) coupling methods. Activities of β-galactosidase (*Kluyveromyces lactis*), α-amylase (*Bacillus subtilis*) and lipase (*Candida rugosa*) were tested towards artificial and natural substrates. β-galactosidase reacted with 2-

nitrophenyl β-D-galactopyranoside and lactose, α-amylase with 4,6-ethylidene-4-nitrophenyl α-D-maltoheptaoside and starch, lipase with 4-nitrophenyl butyrate and olive oil. Activities of these hydrolases were determined spectrophotometrically, by titration (hydrolysis of olive oil) or HPLC-ELSD (monitoring decreasing level of lactose). Strength and stability of linkages between magnetic particles and enzymes were examined as their operational stability.

- [1] Brady, D., Jordaan, J.: Advances in enzyme immobilisation. *Biotechnol. Lett.* 31 (2009) 1639-1650
- [2] Kluchova, K., Zboril, R., Tucek, J., Pecova, M., Zajoncova, L., Safarik, I., Mashlan, M., Markova, I., Jancik, D., Sebel, M., Bartonkova, H., Bellesi, V., Novak, P., Petridis, D.: Superparamagnetic maghemite nanoparticles from solid-state synthesis – Their functionalization towards peroral MRI contrast agent and magnetic carrier for trypsin immobilization. *Biomaterials* 30 (2009) 2855-2863
- [3] Safarik, I., Horska, K., Martinez, L.M., Safarikova, M.: Large scale magnetic separation of *Solanum tuberosum* tuber lectin from potato starch waste water. *AIP Conf. Proc.* 1311 (2010) 146-151

5Po15

IMUNOCHROMATOGRAFICKÁ DETEKCE RODU *LISTERIA* A *CRONOBACTER*

Barbora Javůrková, Martina Blažková, Barbora Haňková, Ladislav Fukal, Pavel Rauch

Ústav biochemie a mikrobiologie VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6

Hlavní obtíž při detekci *Listerie monocytogenes*, rodu *Cronobacter*, ale i jiných patogenů, je potřeba splnit legislativní nároky a prokázat několik mikrobiálních buněk v 10 g vzorku potraviny, resp. naopak dokázat, že se v tomto vzorku žádný patogen nevyskytuje. Proto se dosud osvědčují zvláště klasické kultivační techniky, které umožní po několikadenní kultivaci namnožit a izolovat mikrobiální patogen, jehož identita je následně určena na základě morfologických a biochemických vlastností. Takový postup trvá obvykle 5 až 7 dní. Z hlediska hygienických opatření (HACCP) je však potřebné vědět co nejrychleji, zda je potravina kontaminována, nikoliv až v horizontu více dnů.

Proto jsou vyvíjeny tzv. rychlé metody, využívající různé principy detekce. Cílem je získat výsledek detekce patogenních mikroorganismů co nejdříve, nejpozději do 24 h. Tyto metody by navíc měly být i uživatelsky

snadno a lehce použitelné (friendly use). Vyvinuli jsme postupy imunochemické detekce nukleových kyselin izolovaných z bakterií rodu *Listeria* a *Cronobacter*. Test probíhá na membráně a vizualizace je zprostředkována uhlíkovými částicemi. Byly vybrány optimální podmínky pro průběh polymerázové řetězové reakce, vhodné složení pufrů imuno-chromatografického testu, byl připraven funkční konjugát uhlíkatých částic s neutravidinem. Vypracovaná metoda prokázala 100 % specifitu detekce.

Finanční podpora: Grantová agentura ČR projekt 525/09/1075, Národní výzkumné centrum projekt 2B08050, Výzkumný záměr MSM 6046137305 a Účelová podpora na specifický vysokoškolský výzkum MŠMT (Rozhodnutí č. 21/2011)

5Po16 PROTEKTIVNÍ VLIV EXTRAKTU VINOSERAE NA POŠKOZENÍ DNA

Zuzana Rybková¹, Kateřina Malachová¹

¹*Katedra biologie a ekologie, Přírodovědecká fakulta Ostravské univerzity v Ostravě, Chitussiho 10, 710 00 Slezská Ostrava, zuzana.rybkova@osu.cz*

Cílem studie bylo zhodnotit antioxidační schopnosti rostlinného extraktu *VinOserae* izolovaného z hroznového vína. Extrakt *VinOserae* obsahuje fenolové kyseliny, *t*-resveratrol, antokyany a proantokyanidiny. Pro detekci protektivního účinku extraktu *VinOserae* na oxidační poškození DNA bylo využito molekulárně biologické metody, založené na sledování změn v topologickém stavu plasmidu pBluescript II SK (-). Rozdílná elektroforetická mobilita topologických forem DNA byla hodnocena agarosovou gelovou elektroforézou [1]. V testu s plasmidovou DNA byl protektivní účinek extraktu sledován na základě jeho schopnosti inhibovat vznik řetězových zlomů v DNA, indukovaných peroxidem vodíku v přítomnosti iontů tranzitních kovů. Antioxidační efekt testovaného extraktu byl srovnáván s výsledky získanými v Amesově testu na *Salmonella typhimurium* His⁻ TA102 pro hodnocení mutagenity oxidačních látek [2]. V hodnocení antimutagenických účinků extraktu byla sledována schopnost extraktu inhibovat mutagenitu indukovanou peroxidem vodíku nebo *tert*-butyl hydroperoxidem [3]. Výsledky analýzy DNA řetězových zlomů v plasmidu pBluescript a Amesova testu prokázaly, že se testovaný extrakt *VinOserae* vyznačuje poměrně vysokou antioxidační aktivitou.

*Studie byla podporována projektem CZ.1.05/2.1.00/03.0100 Institut environmentálních technologií (IET), poděkování patří také firmě FAVEA, spol. s r.o. (Kopřivnice, ČR) za poskytnutí extraktu *VinOserae*.*

- [1] Rybková Z., Malachová K.: Chem. Listy 105, 129 (2011).
- [2] Ames B.N., Mc Cann J., Yamasaki E.: Mutat. Res. 31, 347 (1975).
- [3] Kilani S. et al.: Environ. Toxicol. Pharmacol. 20, 478 (2005).

5Po17 CHARAKTERISTIKA LAKTOBACILŮ IZOLOVANÝCH Z TRÁVICÍHO TRAKTU

Pavla Sedláčková, Šárka Horáčková, Milada Plocková

Ústav technologie mléka a tuků, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika

Laktobacily jsou díky svým pozitivním vlastnostem jedním z nejvíce zkoumaných rodů bakterií mléčného kvašení. V této práci byly porovnávány technologické, probiotické a funkční vlastnosti laktobacilů izolovaných ze stolice plně kojených dětí (*L. casei* ZU 10, *L. gasseri* ZU 11, *L. acidophilus* Z1 a *L. acidophilus* Z3) s vlastnostmi komerčního probiotického kmene *L. acidophilus* LA-5 a sbírkového kmene *L. acidophilus* CCDM 406. Izoláty měly menší růstové a kysací schopnosti v mléce. Kmeny izolované z trávicího traktu prokázaly vyšší stabilitu při simulaci prostředí žaludku a tenkého střeva. *L. acidophilus* LA-5 a *L. acidophilus* CCDM 406 měly vyšší schopnost autoagregace. Hydrofobicita povrchu buněk byla nejvyšší u *L. acidophilus* Z3. *L. casei* ZU 10 snížil obsah cholesterolu v médiu o 50 %. Bylo prokázáno, že autoagregace, hydrofobicita povrchu buněk a snižování obsahu cholesterolu v médiu jsou kmenově specifické vlastnosti. Na rozdíl od kmenů izolovaných z trávicího traktu, u kterých byla potvrzena antimikrobiální aktivita, nevykazovaly supernatanty získané po kultivaci *L. acidophilus* LA-5 a *L. acidophilus* CCDM 406 žádnou inhibiční aktivitu a jejich živé buňky jen velmi slabou.

Práce byla podpořena grantem Ministerstva zemědělství ČR Výzkum v agrárním komplexu VAK 2011, podprogram Udržitelný rozvoj agrárního sektoru, č. grantu QI 111B053.

5Po18**MOŽNOSTI VYUŽITÍ BIOMASY
Z FYTOEXTRAKCE TĚŽKÝCH KOVŮ**

Michal Šyc¹, Michael Pohořelý¹, Michal Jeremiáš¹, Petra Kameníková¹, Karel Svoboda¹, Miroslav Punčochář¹

¹Ústav chemických procesů AV ČR, Rozvojová 135/2, Praha 6 - Suchbátka, Česká republika

Jedním z progresivních způsobů nedestruktivní in-situ sanace půd málo či středně kontaminovaných těžkými kovy je fytoextrakce pomocí rychlerostoucích rostlin. Výhody i nevýhody fytoextrakce již byly mnohokrát uvedeny a jsou dobře známé [1]. Dosud nevyřešenou otázkou je ovšem volba správného způsobu nakládání s produkovanou biomasou z fytoextrakce kontaminovanou zvýšeným obsahem těžkých kovů. Jako nejvhodnější způsob je navrhováno její energetické využití pomocí termických procesů [2]. S tím je ovšem spojená celá řada dalších otázek, týkající se bezpečného způsobu dopravy či skladování této biomasy s minimalizací rizik zpětného uvolnění kovů do půdy. Klíčová je i distribuce těžkých kovů při samotném procesu, která je kromě jiného silně ovlivněná reakční atmosférou procesu. V případě spalování biomasy lze očekávat vznik spíše méně těkavých oxidů a retenci těžkých kovů v pevné fázi popelovin [3]. V redukční atmosféře při zplyňování biomasy těkavost těžkých kovů roste a do produkovaného plynu přechází vyšší podíl těžkých kovů. Většina těžkých kovů spojených s fytoextrakcí ovšem patří do skupiny polotěkavých kovů (Zn, Pb, Cd, Cu, Ni, atd.), takže predikovat jejich distribuci není možné bez realizace experimentálních testů. Příspěvek sumarizuje a zhodnocuje možné způsoby předúpravy a termického zhodnocení kontaminované biomasy z hlediska jejich vhodnosti a použitelnosti na základě zkušeností získaných z prvotních experimentálních testů.

Tato práce vznikla díky podpoře Technologické agentury České republiky projektu BROZEN č. TA01020366.

- [1] Baker AJM, McGrath SP, Reeves RD, Smith JAC. Metal hyperaccumulator plants: a review of the ecology and physiology of a biological resource for phyto-remediation of metal-polluted soils, In: Terry N, Bañuelos G, editors. Phytoremediation of Contaminated Soil and Water. Boca Raton: Lewis Publishers CRC; 2000. p. 85–107.
- [2] Sas-Nowosielska A, Kucharski R, Małkowski E, Pogrzeba M, Kuperberg JM, Kryński K. Phytoextraction crop disposal—an unsolved problem. *Environmental Pollution*, 128 (2004)

373–379.

- [3] Šyc M, Pohořelý M, Kameníková P, Habart J, Punčochář M. Willowtrees from Heavy Metals Phytoextraction as Energy Crops, submitted in Biomass and Bioenergy.

5Po19**PŘÍPRAVA KOMOZITNÍCH SORBENTŮ
NA BÁZI HYDRATOVANÉHO OXIDU
ŽELEZITÉHO**

Alena Uzlová¹, Helena Parschová¹, Luděk Jelínek¹

¹Ústav energetiky, VŠCHT v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, Kontakt: email: Alena.Uzlova@vscht.cz, Helena.Parschova@vscht.cz, Ludek.Jelinek@vscht.cz

Hydratovaný oxid železitý patří mezi anorganické sorbenty. Tento sorbent, převážně používaný pro odstraňování oxoaniontů arsenu z vod pro pitné účely, se vyrábí ve formě granulí, jejichž hlavní nevýhodou je nízká mechanická stabilita. Tento problém řeší právě kompozitní sorbenty, kdy je hydratovaný oxid železitý impregnován do klasické ionexové kuličky [1, 2].

Kompozitní sorbenty byly připravovány použitím tří rozdílných ionexových matic, z nichž byla vybrána nevhodnější ionexová matrice, na které byly dále připravovány sorbenty, jejichž příprava se lišila použitím různých činidel a pracovních postupů.

Takto připravované sorbenty byly porovnávány jak mezi sebou, tak s komerčně vyráběnými kompozitními sorbenty i s čistým granulovaným hydratovaným oxidem železitým na základě dvou kritérií. Prvním sledovaným kritériem bylo procentické zastoupení železa v sorbentu. Druhým kritériem pak byla schopnost tohoto sorbentu odstraňovat arsen z vodných roztoků obsahujících pouze oxoanionty arsenu, ale i z roztoků obsahujících kromě arsenu i doprovodné ionty (chloridy a sírany).

- [1] Zhang QuingJian, Pan BingCai, Chen XinQing, Zhang WeiMing, Pan BingJun, Zhang QuanXing, L. LV. & X. S. Zhao: Preparation of polymer-supported hydrated ferric oxide based on Donnan membrane effect and its application for arsenic removal. *Science in China Series B: Chemistry* 51 (4), 379-385, 2008.
- [2] Cumbal L., Sengupta A.K.: Arsenic Removal Using Polymer-Supported Hydrated Iron(III) Oxide Nanoparticles Role of Donnan Membrane Effect; *Environmental science & technology* 39, 6508-6515, 2005.

5Po20
**HYDRODEBROMACE 2,4,6-
 TRIBROMFENOLU PŮSOBENÍM
 KOVOVÝCH SLITIN**

Tomáš Weidlich¹, Lubomír Prokeš²

¹ Skupina chemických technologií, ÚEnviChI, Fakulta chemicko-technologická, Studentská 573, 532 10 Univerzita Pardubice, tomas.weidlich@upce.cz

² Ústav chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova Univerzita, Kotlářská 2, 611 37Brno

Ve světě se vyrábí 9500 tun 2,4,6-tribromofenolu (TBF), což tuto látku řadí mezi nejmasověji vyráběné bromované fenoly. TBF je využíván jako zpomalovač hoření do plastů užívaných při výrobě elektroniky, v posledních letech je ve formě sodné soli používán jako náhrada pentachlorfenolu při konzervaci dřeva. Díky jeho stále většímu využívání se TBF objevuje v půdě i vodě. Od roku 1998 je TBF zařazen agenturou EPA do seznamu nebezpečných látek [1].

Pro odbourávání TBF rozpuštěného v odpadních vodách jsou obvykle aplikovány postupy chemické oxidace zahrnující použití Fentonova činidla $\text{Fe}^{+2}/\text{H}_2\text{O}_2$, kombinaci působení peroxidu vodíku a UV záření [2]. Jejich hlavní nevýhodou je nutnost použít velký přebytek oxidačního činidla. Redukční procesy nakládání s halogenovanými kontaminanty v odpadních vodách využívají procesu hydrodehalogenace, kdy dochází k substituci halogenu ve struktuře halogenderivátu za vodík. Liu publikoval použití práškové Al-Ni slitiny pro hydrodebromaci

tetrabromobisfenolu A (retardantu hoření do plastů) ve vodném roztoku hydroxidu sodného za varu v přítomnosti velkého přebytku Raneyovy Al-Ni slitiny [3]. Hydrodebromace bromovaných fenolů však probíhá v alkalickém vodném prostředí i za normální teploty, kromě Raneyovy Al-Ni slitiny lze pro tuto reakci použít i Devardovu Al-Cu-Zn slitinu. Náš příspěvek se zabývá problematikou využití těchto kovových slitin pro hydrodebromaci a možnostmi recyklace práškového niklu, respektive mědi.

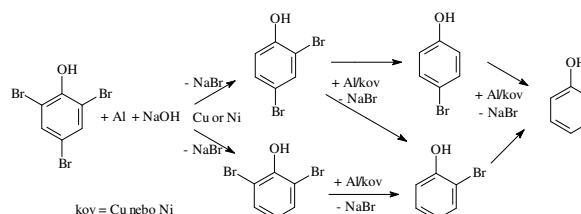


Schéma. 1: Reakční schéma hydrodebromace TBF

Tento příspěvek byl realizován za finanční podpory z prostředků TA ČR (TA01010606) a z výzkumného záměru MŠMT 0021627502.

- [1] M. Gutierrez, J. Becerra, J. Godoy, R. Barra, *Int. J. Environ. Health Res.* **15**, 171 (2005).
- [2] a) H. Suty, C. De Traversay, M. Cost, *Water Sci. Technol.* **49**, 227 (2004); b) J. Rodriguez, C. Parra, D. Contreras, J. Freer, J. Baeza, *Water Sci. Technol.* **44**, 251 (2001).
- [3] Liu G.-B., Dai L., Gao X., Li M.K., Thiemann T.: *Green Chem.* **8**, 781 (2006).

POSTERY - SEKCIA 6 CHEMPROGRESS

6Po01

VLIV DOPOVÁNÍ MEMBRÁNY POLYBENZIMIDAZOLOVÉHO TYPU KYSELINOU FOSFOREČNOU NA CHARAKTERISTIKY VYSOKOTEPLTNÍHO MEMBRÁNOVÉHO PALIVOVÉHO ČLÁNKU

Marek Doležel, Petr Mazúr, Martin Paidar, Karel Bouzek

Ústav anorganické technologie, VŠCHT
Praha, Technická 5, Praha 6, 166 28,
mar.dolezel@seznam.cz

Palivový článek představuje elektrochemický membránový reaktor umožňující přímou přeměnu chemické energie paliva na energii elektrickou. Vysokoteplotní palivový článek s polymerním elektrolytem pracující v rozmezí teplot 150 – 200 °C vykazuje díky zvýšené pracovní teplotě řadu výhod: rychlejší kinetiku elektrodových reakcí, menší citlivost na čistotu paliva, jednodušší vodní režim a snazší kontrolu provozní teploty. Elektrolytem je u tohoto typu článku polymerní membrána na bázi polybenzimidazolu (PBI), která impregnační kyselinou fosforečnou získává protonovou vodivost.

Byl sledován hmotnostní přírůstek PBI membrány v závislosti na délce impregnace kyselinou fosforečnou. Metodou elektrochemické impedanční spektroskopie byla následně stanovena iontová vodivost takto připravených membrán při teplotě 160 °C. V laboratorním vodíkovém palivovém článku byl poté sledován vliv stupně impregnace membrány na jeho provozní charakteristiky.

Během prvních 4 hodin impregnace byl pozorován výrazný nárůst hmotnosti i iontové vodivosti membrány. Delší doba impregnace již neměla na tyto parametry výrazný vliv. Vyšší obsah kyseliny fosforečné v membráně významně zlepšoval výkonové charakteristiky palivového článku z důvodu její vyšší vodivosti a vyššího stupně využití katalyzátoru v katalytické vrstvě.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum MŠMT (Rozhodnutí č.21/2011) a projektu DEMMEA FCH-JU-2008-1, č. 245156.

6Po02

ŘÍZENÉ UVOLŇOVÁNÍ KOFEINU Z HYDROFILNĚ-LIPOFILNÍCH MATRIC NA BÁZI OXYCELULOSY

Jan Gajdziok¹, Barbora Vraníková¹, David Vetchý¹, Hana Landová¹, Martina Bajerová¹, Kateřina Dvořáčková¹, Jan Muselík¹, Jakub Vysloužil¹

¹Ústav technologie léků, Farmaceutická fakulta, VFU Brno, Palackého 1/3, 61242 Brno, gajdziokj@vfu.cz

Matricové tablety představují nejjednodušší design lékové formy s řízeným uvolňováním [1]. Jsou tvořeny léčivem rovnoměrně rozptýleným v nosné pomocné látce, která řídí uvolňování léčiva [2]. Nosný polymer může být ve vodě nerozpustný (nerozpustné matrice), lipofilního charakteru (lipofilní matrice) nebo může ve vodě bobtnat a vytvářet gelovou vrstvu (hydrofilní matricové tablety). Polymery se v matricových tabletách používají buď samostatně, nebo v kombinacích, z důvodu optimalizace profilu uvolňování léčiva (hydrofilně-lipofilní matrice) [3].

Oxidovaná celulóza je v porovnání s jinými deriváty celulózy doposud méně používanou pomocnou látkou. Její deriváty ve vodním prostředí hydratují a při dosažení dostatečné koncentrace vytvářejí thixotropní gel. Tuto schopnost je možné využít v technologii přípravy hydrofilně-lipofilních matric.

Cílem experimentu bylo hodnocení vlivu sodné soli oxycelulózy na rychlost uvolňování kofeinu a jakostní parametry hydrofilně-lipofilních matric. Tablety byly připraveny lisováním granulátu získaného termoplastickou granulací s montanglykolovým voskem. Jednotlivé šarže obsahovaly proměnlivé množství dvou hydrofilních bobtnajících polymerů – hydroxypropylmethylcelulózy (HPMC) K4M a sodné soli oxycelulózy (NaOC).

Nejllepší vlastnosti vykazoval vzorek s obsahem 80 mg HPMC a 20 mg NaOC, u něhož bylo uvolňování kofeinu prodlouženo na 5 hodin, čímž se získá 7-8 hodin trvající centrálně stimulující účinek. Prodloužení povzbuzujícího efektu kofeinu je možné využít u povolání, která vyžadují zvýšenou pozornost, popřípadě dlouhodobější bdělost.

Tento projekt byl realizován za finanční podpory z prostředků státního rozpočtu prostřednictvím Ministerstva průmyslu a obchodu (projekt ev. č. 2A-ITP1/073).

[1] DVOŘÁČKOVÁ, K., et al. Termoplastická granulace jako alternativa přípravy hydrofilně-

lipofilních perorálních matricových tablet. *Česká a slovenská farmacie*. 2007, roč. 56, č. 3, s. 129-134.

- [2] DVOŘÁČKOVÁ, K. Principy uvolňování léčiv z perorálních matricových tablet obsahujících hypromelosu. *Chemické listy*. 2009, roč. 103, č. 1, s. 66-72.
- [3] SEDLÁKOVÁ, M.; RABIŠKOVÁ, M.; SPILKOVÁ, J. Přírodní polymery pro formulaci hydrofilních matricových tablet. *Česká a slovenská farmacie*. 2006, roč. 55, č. 1, s. 4-11.

6Po03

DETERMINATION OF DIFFUSION COEFFICIENTS BY DIGITAL PROCESSING OF SORPTION EXPERIMENTAL DATA

Vladimír Hanta¹, Jaroslav Poživil¹, Karel Friess², Ondřej Vopička², Vladimír Hynek², Miroslav Zgažar², Milan Šípek²

¹Institute of Chemical Technology, Department of Computing and Control Engineering, Technická 5, 166 28 Prague 6, Czech Republic, hantav@vscht.cz, pozivilj@vscht.cz

²Institute of Chemical Technology, Department of Physical Chemistry, Technická 5, 166 28 Prague 6, Czech Republic, friessk@vscht.cz, vopickao@vscht.cz, hynekv@vscht.cz, zgazarm@vscht.cz, sipekm@vscht.cz

Experimental data obtained during gravimetric sorption experiments are distorted by random noise. The noise contains no useful information for determining the integral diffusion coefficients and can significantly affect the results.

Knowledge from different disciplines is used the contribution so that the information contained in experimental data is utilized as much as possible. The used procedure is based on knowledge of control theory, modelling and experimental identification, digital signal processing and nonlinear optimization. The theoretical model describing dynamics of sorption of organic vapours in polymeric membranes is modified according due to the measuring chamber dynamics. The modelled course of vapour pressure after its injection into the measuring chamber more corresponds to the measured one. The random noise is eliminated from the useful signal using low-pass digital filters. Parameters of the mathematical model are successfully determined by the flexible polyhedron method.

This procedure is realized by a program developed in integrated environment for technical computing MATLAB. Many decision-making processes are not possible to completely transform into form of algorithmic rules. The

entire computational procedure is visualized by a number of subsequent figures that enable to change the parameters of both the model and computational procedure interactively.

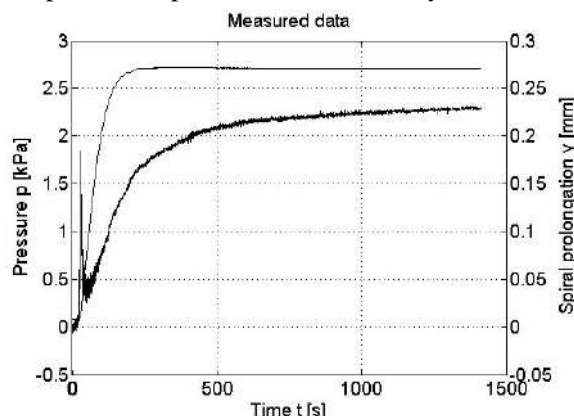


Fig. 1 Measured values of pressure and prolongation

The work has been supported by the funds No. MSM 6046137306 and No. MSM 6046137307 of Ministry of Education of the Czech Republic. This support is very gratefully acknowledged.

- [1] Ondřej Vopička, Vladimír Hynek, Miroslav Zgažar, Karel Friess, Milan Šípek: A new sorption model with a dynamic correction for the determination of diffusion coefficients, *J. Membr. Sci.* 330 (2009), 51–56
- [2] Karel Friess, Vladimír Hynek, Milan Šípek, Ondřej Vopička, Miroslav Zgažar, Jaroslav Poživil, Vladimír Hanta: Filtering and smoothing of experimental data obtained during gravimetric sorption experiments, *Proc. 5th Membrane Science and Technology Conference PERMEA (2010)*, 672–682
- [3] Karel Friess, Vladimír Hynek, Milan Šípek, Ondřej Vopička, Miroslav Zgažar, Jaroslav Poživil, Vladimír Hanta: Digital processing of experimental data obtained during gravimetric sorption experiments, *Proc. 38th International Conference of SSCHE (2011)*, 412–421

6Po04

VLIV PŘIROZENÉHO KOLÍŠÁNÍ KONCENTRACE KATIONTŮ VE DŘEVĚ NA VÝTĚŽEK THERMOLÝZNÍHO BIOOLEJE

Zdeněk Krpelík¹, Ladislav Kurc¹, Libor Červený¹

¹Ústav organické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika, Zdenek.Krpelik@vscht.cz

Úvod: Nejrozšířenějším obnovitelným zdrojem energie na Zemi je biomasa. Tu lze pomocí procesu rychlé pyrolýzy (thermolýzy) převést na žádané kapalné palivo - bioolej. Rychlá pyrolýza dřeva probíhá při teplotách, při kterých se

katalyticky uplatňují také obsažené anorganické prvky vázané v pletivech dřevní hmoty.

Cíle práce: Pomocí Py-GC-MS zjistit závislost výtěžku kapalného podílu (biooleje) na přirozeném obsahu anorganických, katalyticky aktivních prvků.

Experimentální podmínky a výsledky: Měření byla prováděna v pyrolyzní píce Pyrojector II, která byla napojena na injektor plynového chromatografu s hmotnostní detekcí. Pro každý vzorek dřeva byla zjištěna optimální teplota pyrolyzy, při níž je nejvyšší výtěžek kapalného podílu (biooleje). Ve vzorcích dřeva (pocházejících z desítek lokality ČR) byl sledován obsah deseti kationtů (Al, Ca, Cu, Fe, K, Mg, Mn, Na, Ni, Zn). Pro pyrolyzní měření byly vybrány takové vzorky dřeva, které obsahovaly zvýšenou koncentraci jednoho z uvedených prvků, přitom koncentrace ostatních byla přibližně průměrná.

Vliv anorganických prvků obsažených ve dřevě na jeho termolýzu byl hodnocen z hlediska výtěžku kapalného podílu. Některé anorganické prvky mohou působit negativně na výtěžek kapalného podílu (kovy alkalických zemin), některé mají na tento výtěžek pozitivní vliv (Al, Cr, Fe, Mn, Zn). Byly pyrolyzovány pouze nativní vzorky dřeva s přirozeně zvýšeným obsahem prvků.

Autoři děkují MZe České republiky (projekt č. QH91303) a Grantové agentuře České republiky (číslo grantu 203/08/H032) za finanční podporu.

6Po05 VLIV OBSAHU PLASTIFIKÁTORU NA PŘÍPRAVU A VLASTNOSTI MUKOADHEZIVNÍCH FILMŮ Z OXYCELULOSY

Hana Landová¹, Jan Gajdziok¹, David Vetchý¹,
Martina Bajerová¹, Kateřina Dvořáčková¹, Jan
Muselík¹, Jakub Vysloužil¹

¹Ústav technologie léků, Farmaceutická fakulta, VFU
Brno, Palackého 1/3, 612 42 Brno, landovah@vfu.cz

Onemocnění sliznice dutiny ústní, je skupina chorob, s nimiž se v průběhu života setká drtivá většina populace. Tyto problémy vyplývají z jejího trvalého vystavení působení vnějších vlivů, souvisejících s příjmem potravy, dýchacími procesy a mluvením [1].

Hlavní nevýhodou lékových forem používaných ve farmakoterapii těchto defektů (ústní vody, gely, pasty) je jejich krátká doba setrvání v místě aplikace a tudíž nutnost aplikovat tyto přípravky opakovaně. Moderní mukoadhezivní flexibilní

filmy přispívají k výraznému prodloužení doby aktivní farmakoterapie a značně omezují četnost opakování aplikace léčivých přípravků, jejich spotřebu a ekonomickou náročnost léčby.

Cílem tohoto sdělení je popsat vliv druhu a obsahu plastifikátoru na přípravu a vlastnosti mukoadhezivních filmů určených ke krytí slizničních defektů dutiny ústní. Flexibilní filmy byly připraveny metodou odpařování rozpouštědla. Sodná sůl oxycelulose byla zvolena jako vhodný základ pro přípravu těchto filmů, protože je netoxická, schopná vytvářet s mucinem ústní sliznice vodíkové můstky a má hemostatické, antibakteriální a hojivé účinky [2]. Připravené filmy ve formě pevných, tenkých, mukoadhezivních náplastí jsou určeny ke krytí slizničních defektů dutiny ústní. Pod tyto filmy může být aplikován vhodný léčivý přípravek ve formě běžně používaných orálních gelů, past nebo prášků, čímž se zajistí dlouhodobější setrvání účinné látky v místě aplikace.

Tento projekt byl realizován za finanční podpory z prostředků státního rozpočtu prostřednictvím Ministerstva zdravotnictví ČR (projekt ev. č. NT11396) a z grantu IGA VFU Brno (projekt ev. č. 45/2011/FaF).

- [1] Jan Gajdziok, Eliška Tajovská, Martina Bajerová, Zuzana Chalupová: Prakt. lékáren., (2009)
[2] Jan Gajdziok, Martina Bajerová, Zuzana Chalupová, Ruta Masteiková: Česká a slovenská farmacie (2007)

6Po06 NOSIČE ANODICKÉHO KATALYZÁTORU PRO ELEKTROLÝZU VODY TYPU PEM

Petr Mazúr, Jan Vít, Martin Paidar, Karel Bouzek

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

Kyselá membránová elektrolýza vody (typ PEM) je charakteristická vysokou účinností a flexibilitou. Její výzkum je motivován zejména plánovaným využitím v systémech pro ukládání elektrické energie v obdobích nadprodukce. K zajištění dostatečné intenzity procesu jsou používány elektrokatalyzátory na bázi platinových kovů. Jednu z hlavních výzev výzkumu v dané oblasti tak dnes představuje zvýšení stupně využití katalyzátorů a tak snížení jejich potřebné navážky. Jednou z možností, jak dosáhnout tohoto cíle představuje použití vhodného nosiče.

V rámci této práce byl zkoumán potenciál oxidu titanu jako jednoho z typických nosičů

katalyzátoru pro využití v této oblasti, konkrétně jako nosiče oxidu iridičitého jako anodového katalyzátoru. Katalyzátor byl na studované nosiče o různém měrném povrchu nanesen pomocí Adamsovy fúze [1]. Distribuce katalyzátoru na povrchu nosiče byla pozorována pomocí řádkovací elektronové mikroskopie. Katalytická aktivita vzorků byla měřena pomocí techniky tenkého filmu na rotační diskové elektrodě. Následně byly katalyzátory testovány v laboratorním elektrolyzáru při zvýšené teplotě a tlaku.

Byl pozorován pozitivní vliv nosiče na distribuci katalytických částic v katalytické vrstvě. Byla zjištěna závislost katalytické aktivity na měrném povrchu nosiče. S rostoucím povrchem nosiče roste navážka oxidu iridičitého potřebného k dosažení odpovídající aktivity katalyzátoru. Příčinou je pravděpodobně nutnost vytvoření kompaktního elektronově vodivého filmu pokrývajícího značnou část povrchu nosiče.

Tento výzkum probíhá za finanční podpory Ministerstva průmyslu a obchodu ČR v rámci projektu číslo: FR-TI2/442.

[1] R. Adams, R.L. Shriner, *Journal of the American Chemical Society* **45** (1923), pp. 2171–2179

6Po07 ŘEŠENÍ OBSAHOVÉ STEJNOMĚRSTI SMĚSÍ S OBSAHEM LÉČIVA S ÚZKÝM TERAPEUTICKÝM INDEXEM PRO PŘÍMÉ LISOVÁNÍ

Aleš Franc¹, Jan Muselík¹, Jana Kvapilová¹,
Radka Máslová¹

¹ Ústav technologie léků, Farmaceutická fakulta VFU
Brno, Palackého 1/3, 612 42 Brno, muselikj@vfu.cz

V současné době probíhá diskuse ohledně generických náhrad léků s obsahem léčiv s nízkým terapeutickým indexem. Příkladem je warfarin. Jelikož při léčbě generickými náhradami existovaly v minulosti případy zdravotních komplikací až náhlých úmrtí způsobenými nepatrnými rozdíly v plazmatických hladinách, bylo v některých zemích zakázáno zahájit léčbu generickými léky s obsahem warfarinu [1].

Progresivní technologií přípravy tablet je tzv. přímé lisování. Během procesu mísení ovšem dochází k tzv. segregaci účinné látky. Proto se dodnes při přípravě tablet s nízkým obsahem účinných látek využívá granulace. To ovšem značně prodlužuje a v důsledku prodražuje výrobu, zhoršuje stabilitu a samozřejmě i zvyšuje cenu léků. Metoda přímého lisování pevných

lékových forem s obsahem těchto látek zůstává nedořešena a farmaceutické firmy věnují enormní úsilí k jejímu zavedení a optimalizaci pro výrobu tablet s nízkým obsahem látek s úzkým terapeutickým indexem [2].

Na uniformitě směsi se podílí několik parametrů. Tato práce ukazuje vztahy mezi vybranými parametry a výslednou uniformitou lékové formy. Konkrétně se jedná o vliv různých plniv, přísady kluziva v různém stupni mísení a konečně i celkovou dobu homogenizace. Technologie přímého lisování by měla vést nejen k bezpečné farmakoterapii, ale i k úspoře času, materiálů a snížení nákladů resp. ceny vyráběných léků.

Tato práce vznikla za podpory projektu IGA VFU Brno č. 39/2011/FaF.

[1] Maureen Burns: *Journal of Thrombosis and Thrombolysis*, (1999)

[2] Filip Vanhoutte, Guy Smans, Luc Janssens, Marc Vanstockem: *Pharmaceutical Technology*, (2008)

6Po08 CHARAKTERISTIKA PEVNÝCH VÁPENATÝCH CHEMOSORBENTŮ PRO ZACHYCOVÁNÍ SULFANU

Jan David¹, Ivona Sedlářová¹, Jan Vídenský¹

¹VŠCHT Praha, Ústav anorganické technologie,
Technická 5, 166 28 Praha 6,
Ivona.Sedlarova@vscht.cz

Odsiřování plynů, kde síra je přítomna ve formě sulfanu, je důležité v mnoha technologiích z důvodu jejich použití v následujících procesech. K odstranění sulfanu z generátorového plynu lze s výhodou využít pevných chemisorbentů na bázi oxidů kovů s vhodnými texturními vlastnostmi. V této práci byla z důvodu dobré dostupnosti, výhodných ekonomických podmínek a dostatečné afinity k sirným sloučeninám větší pozornost věnována chemisorbentům na bázi vápníku, speciálně pak oxidu vápenatému, který lze získat kalcinací vápence.

Experimentálně byla sledována změna struktury vápence z lokality Čertovy schody (frakce 4 – 5 mm) během kalcinace za různých podmínek. Teplota výpalu se pohybovala od 500°C do 1000°C a doba výpalu od 0 (pec vypnuta po dosažení požadované teploty) do 5 hodin. Gravimetricky byl stanoven stupeň konverze a metodou rtuťové porozimetrie proměřeny texturní charakteristiky chemisorbentů získaných po výpalu. Stanovené údaje byly porovnány a vyplývalo z nich, že nejvhodnější struktura vzorku byla získána kalcinací vápence při teplotě 1000°C po dobu jedné hodiny.

Autoři děkují za finanční podporu Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy České republiky v rámci projektu č. MSM 6046137301.

6Po09
STUDIUM VLASTNOSTÍ MĚDĚNÉHO NOSIČOVÉHO KATALYZÁTORU PRO SELEKTIVNÍ HYDROGENACI FURFURALU NA FURFURYLALKOHOL

Daniela Strejcová, Bohumír Dvořák, Gabriel Tóth

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

Selektivní hydrogenace furfuralu v plynné nebo kapalně fázi je jedinou průmyslově používanou metodou pro výrobu furfurylalkoholu. Nejčastěji je hydrogenace furfuralu urychlována měďnato-chromitými katalyzátory, které jsou však problematické z enviromentálního hlediska, méně často jsou používány katalyzátory typu CuO/ZnO-Al₂O₃. Teprve v posledních 15 letech se zájem o tento typ katalyzátorů zvyšuje. Jejich modifikací, zejména promotory na bázi kobaltu[1], manganu[2], nebo železa dochází k růstu efektivní aktivity a jejich selektivita je zvyšována chemickými promotory jako MgO [2, 3], nebo Na₂CO₃.

Obsahem posteru jsou informace o současném stavu vývoje nového katalyzátoru pro průmyslovou výrobu furfurylalkoholu, prostého složek zatěžujících životní prostředí. Nový katalyzátor má potenciál nahradit dosud užívané katalyzátory měďnato-chromitého typu. Sdělení je zaměřeno na výsledky dosažené při optimalizaci obsahu alkálií v relaci k užitným vlastnostem nově vyvíjeného katalyzátoru typu CuO/ZnO-Al₂O₃. Alkalizace tablet měla ve sledovaném intervalu pozitivní vliv především na mechanické vlastnosti tablet katalyzátoru a růst jeho selektivity vzhledem k tvorbě nežádoucích produktů. Pozitivní vlivy chemického promotoru bylo nutno optimalizovat ve vztahu k protichůdně působícímu vlivu na efektivní aktivitu katalyzátoru.

Byl vyvinut katalyzátor s lepšími užitnými vlastnostmi, než vybraný dosud komerčně vyráběný a užívaný standard měďnato-chromitého typu. Hlavní předností nového katalyzátoru je 2,5 krát nižší obsah CuO, který je nejdražší složkou katalyzátoru.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č. 21/2011).

[1] D. Zhang, F. Liu, F. Li and C. Yang, Gongye Cuihua, 15 (2007) 52.

[2] S.-S. Qu and X.-R. Chen, Fenzi Cuihua, 23 (2009) 222.

[3] D. Zhang, Preparation of catalyst for gas phase hydrogenation of furfural to furfuryl alcohol, China National Academy of Nanotechnology and Engineering, CN Patent 101423505, 2009.

6Po10
PŘÍPRAVA MIKROČÁSTIC S OBSAHEM TRAMADOL-HYDROCHLORIDUMETODOU ODPAŘENÍ ROZPOUŠTĚDLAZ DVOJITÉ EMULZE V/O/V

Jakub Vysloužil¹, Kateřina Dvořáčková¹, Martina Bajerová¹

¹Ústav technologie léků, Farmaceutická fakulta, Veterinární a farmaceutická univerzita Brno, Palackého 1/3, 612 42 Brno

Mikročástečkové lékové systémy z biodegradovatelných polymerů představují moderní lékovou formu splňující požadavky na lékové formy s řízeným uvolňováním léčiva. Jednou z nejpoužívanějších metod pro přípravu mikročástic je metoda odpařování rozpouštědla. Tato technika je levná, rychlá a nevyžaduje speciální laboratorní vybavení. Díky několika modifikačním metody je možné enkapsulovat širokou škálu hydrofilních i hydrofobních léčiv včetně peptidů, proteinů, steroidních sloučenin a cytostatik. Nejčastěji používanými polymery jsou pak kyselina polymléčná a kopolymer kyseliny mléčné a glykolové [1].

Základem metody je emulze, popř. soustava emulzí, která ve vnitřní fázi obsahuje rozpuštěný polymer a rozpuštěné či dispergované léčivo. Z této emulze se za stálého míchání rozpouštědlo vnitřní fáze odpařuje, díky čemuž dochází k formování polymerní matrice mikročástic. Formující se matrice pak v sobě uzavírá přítomné léčivo[2].

Cílem této práce bylo připravit mikročástice z kopolymeru kyseliny mléčné a glykolové s obsahem léčiva pro perorální použití. S ohledem na použitou metodu se jako modelové léčivo použil dobře rozpustný tramadolhydrochlorid, který je stále žádoucím analgetikem opioidního typu při léčbě středně silné bolesti. V rámci optimalizace byla sledována závislost přípravy na a optimalizovat jejich přípravu v závislosti na formulačních (např. různé vzájemné poměry stěnotvorných polymerů, různá organická rozpouštědla) a procesních parametrech (např. rychlost míchání emulze, teplota fází). Dále byl také sledován vliv vybraných formulačních a

procesných parametrov na vlastnosti pripravených mikročastic.

- [1] Li M., Rouaudand O., Poncelet D.: *Int. J. Pharm.* 363, 26 (2008).
 [2] Freitas S., Merkle H. P., Gander B.: *J ControlRelease.* 102, 313 (2005).

6Po11

PROPERTIES OF POST- PROCESSED RuO₂/TiO₂ STRUCTURES ANALYSED BY SIMS

Andrej Vincze¹, Boris Hudec², Karol Fröhlich², Miroslav Michalka¹

¹*International Laser Centre, Ilkovicova 3, 841 04 Bratislava, vincze@ilc.sk*

²*Institute of Electrical Engineering, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 841 01 Bratislava, Slovakia*

The dynamic random access memory (DRAM) devices are based on the technology of RuO₂ thin film capacitor electrodes with TiO₂ dielectrics. The polycrystalline RuO₂ thin films can be prepared by metal organic chemical vapour deposition (MOCVD) on Si substrate. RuO₂ bottom electrode serves also as a seed layer for TiO₂ dielectric layer. In this case, the TiO₂ layer grown by Atomic Layer Deposition (ALD) crystallizes in the very high permittivity rutile structure [1].

Post-deposition annealing of prepared structures is needed in order to dramatically decrease the

leakage current densities. The exact mechanism is hidden behind annealing processes. RuO₂/TiO₂ structures annealed in nitrogen and oxygen ambient were analysed using Secondary Ion Mass Spectrometry (SIMS) method and by electrical C-V and I-V measurements, from which the leakage current mechanisms can be deduced.

In the RuO₂/TiO₂ and RuO₂/Si interfaces higher concentration of Carbon was detected and in the opposite, the Hydrogen concentration is decreased. The nitrogen annealing induces a broader SiO₂ profile also in the RuO₂/TiO₂ interface, while the oxygen annealing moves this SiO₂ into the upper surface RuO₂ bottom electrode. This method permits to see changes at the interface and in impurity concentrations due to annealing.

This work was done with support of Slovak Grant Agency grant VEGA 1/0787/09 and of Slovak Research and Development Agency grant APVV 0509-10.

- [1] B. Hudec, K. Hušková, E. Dobročka, J. Aarik, R. Rammula, A. Kasikov, and A. Tarre, A. Vincze, K. Fröhlich, Atomic layer deposition grown metal-insulator-metal capacitors with RuO₂ electrodes and Al-doped rutile TiO₂ dielectric layer, *J. Vac. Sci. Technol. B* 29 (1), Jan/Feb 2011 1071-1023/2011/29(1) pp.01AC09-1 -4

AUTORSKÝ INDEX

A

Abelová L.....	227
Abusenaina A. M. M.	150
Adam M.	146
Adamek E.....	179, 254
Adámková R.	98
Adamkovič E.....	114
Addová G.	175, 176, 177
Adolfová L.	179
Al-Maadeed M.A.	231
Amann A.	175, 177
Ambrová M.....	148
Andělová B.	67, 112, 113, 236
Andics A.	211
Andicsová A.....	244
Andrezálová L.....	204

Annus J.	122
Antic B.....	182

B

Babjak M.....	228
Babuněk M.....	205, 221
Bačáková L.	198
Bajerová M.	264, 266, 268
Bajerová P.....	138, 146, 148
Bajus M.....	125
Baláž P.	182
Baňasová M.	205, 216
Banášp.....	124, 298
Bancířová M.....	123
Baran W.	179, 254
Barbieriková Z.	80, 141, 158, 283
Barborík P.....	86, 285

Barek J.	71, 72, 137, 144, 145, 147, 156, 162, 163, 165,
Bartoš M.	202
Bartosova Z.	84, 284
Bartusek S.	78, 259, 283
Bazelová Z.	180
Bednářová L.	107
Beier P.	100, 206
Beinrohr E.	76
Bekešová S.	108
Belák M.	255
Beláňová M.	142, 235
Bella M.	80, 141, 283
Bělohav Z.	125
Benčíková E.	130
Benco L.	196
Beneš L.	191, 202
Benko J.	150
Berek D.	99
Berešík M.	130
Berezkin V. G.	175, 177
Berkeš D.	231
Bessada C.	87, 285
Bezdička P.	194
Bhanger M. I.	147
Bílek M.	115
Blahut J.	180
Blaško J.	175, 176, 177
Blažková M.	260
Blechová Z.	210
Bobeničová M.	142
Boča M.	85, 86, 188, 285
Bodor R.	142, 163
Boháč A.	209
Boháček J.	194
Boháčík P.	183
Bohdanecký L.	171
Bolaños E. A.	96
Borská K.	98
Bosáková Z.	147, 155
Boudinet D.	105
Bouzek K.	128, 130, 131, 264, 266
Brestenská B.	115
Breza M.	142
Brezová V.	80, 141, 158, 283
Brndiar J.	85
Brož B.	206
Brožek V.	192
Brusová H.	238
Bubeníková M.	143
Buchta M.	208
Buchta V.	224
Budovská M.	207
Bugár I.	81, 152, 168, 283
Bujdák J.	95
Bukovská L.	180
Bulíčková J.	153
Bureš F.	111
Burgert L.	210
Bustin D.	76, 170
<hr/>	
C	
Cabáková G.	259
Cabal J.	228
Čabala R.	146, 176
Čacho F.	76
Čajan M.	186
Capek P.	203, 208, 250
Cardová L.	209
Čech J.	202
Čechová M.	187
Cehlárik E.	209
Čermáková H.	111
Černák J.	183, 188, 199
Černušák I.	81, 150, 283
Černý M.	210
Červený L.	227, 242, 247, 265
Červený V.	143, 151
Chapkanov A.	249
Chernykh Y.	206
Chmela Š.	214, 217
Chmelová D.	258
Chmielová M.	67
Chodák I.	109, 132, 135, 219, 224
Chorvát D., Jr.	106, 220, 230, 239, 240
Christensen E.	129
Chudoba R.	139
Chytil P.	217
Cívik B.	132
Čibová A.	210
Cibulka R.	70, 102
Cigáň M.	215
Čík G.	168
Císařová I.	180
Čižmár E.	199
Čižmárik J.	154
Čopan P.	181
Čopíková J.	241
Cossío F.	245
Coufal P.	147, 157, 167
Csomorová K.	97, 106
Culková E.	76
Cvačka J.	138
Cybulski H.	105
Czaniková K.	209
Czímerová A.	95

D

Danč L.....	73, 144, 282
Daňhel A.....	71, 137, 281
Danielik V.....	87, 185, 285
Danko M.....	98, 211, 237
Datinská V.....	67
David J.....	267
David T.....	181
Dědík J.....	71, 281
Degano I.....	164
Dejmková H.....	71, 144, 174, 281
Deýlová D.....	71, 145, 281
Dimzoski B.....	90, 286
Djurado D.....	105, 223
Doháňošová J.....	211
Dohnalová Ž.....	179
Doležel M.....	264
Doskočil L.....	145
Doubnerová V.....	157
Doušová B.....	120, 185, 187, 189
Drábik R.....	132
Drabina P.....	212
Drajna L.....	103, 148, 212, 290
Drakselová M.....	128
Drašar P.....	209, 220, 232, 245
Dudíková J.....	255
Dufková V.....	146
Řuračková A.....	108
Řuračková Z.....	204
Řurčeková M.....	187
Dušková-Smrčková M.....	216
Dvořáčková K.....	264, 266, 268
Dvořák B.....	268
Dvořáková E.....	118
Dvořáková H.....	220
Dvoranová D.....	141, 142
Dvorský R.....	78, 79, 283
Dzimbova T.....	249

E

Eckhardt A.....	75
Economou A.....	145
Edebo L.....	117
Ehn M.....	213
Eisner A.....	92, 138, 146, 148
Elbert T.....	227
Erben M.....	90, 186, 287
Espevik T.....	222
Etrych T.....	217, 246
Exnerová M.....	214

F

Fabian M.....	182
Fábry M.....	107
Falvello L. R.....	199
Fargašová A.....	89, 257, 286
Fařarová M.....	72, 281
Fázik V.....	256
Fellner P.....	87, 185, 285
Férriz J.M.....	218
Fiala J.....	127
Fiedlerová A.....	214
Filip J.....	83, 284
Filo J.....	215
Findoráková L.....	222
Fischer J.....	71, 147, 281
Fišera L.....	229
Flórián K.....	150
Florián Š.....	135
Foltánová K.....	183
Fortelný I.....	90, 286
Franc A.....	267
Franc M.....	147
Friess K.....	265
Fröhlich K.....	269
Fronc M.....	244
Frumar M.....	116, 202, 295
Frumarová B.....	202
Fry A. J.....	110
Fryš O.....	138, 146, 148
Fukal L.....	260

G

Gabčová J.....	185
Gajdziok J.....	264, 266
Gál.....	80, 283
Gál M.....	148, 153
Gaľa L.....	148
Galeštoková Z.....	215
Galusek D.....	181
Gancarz R.....	250
Gatenholm P.....	216
Gažák R.....	173
Gemeiner P.....	83, 284
Girmanová J.....	256
Gonda J.....	101
Góra R.....	82, 284
Górová R.....	175, 176, 177
Goruška J.....	149
Gracza T.....	211, 228, 249
Grančičova O.....	152
Grančičová O.....	149

Grazulevicius J. V.	105
Greifová M.	68
Grochala W.	93
Grüner B.	143
Gryko D.	248
Grym J.	86, 285
Gurišová V.	188
Gyepes R.	195
Gyepesová D.	182
Györyová K.	195
Györyová K.	222

H

Haas H.	69
Hájeková E.	125
Halaška J.	96
Halászová S.	150
Halko R.	84, 284
Halouzka V.	77, 84, 284
Hámborská M.	150
Hamplová V.	172
Hamuřáková S.	103, 212, 216, 290
Haníková J.	183
Haňková B.	260
Hanta V.	127, 265
Hanusek J.	234, 236
Havel J.	236
Havlíček D.	121
Havlíček L.	226
Havlíčková J.	181
Hejtmánek J.	89, 199, 286
Hejtmánek V.	203
Held L.	68
Hercegová A.	72
Herchel R.	200
Herčko I.	113
Hermann P.	195
Híveš J.	148
Hlásniková J.	122, 255
Hloušková Z.	132
Hnát I.	116
Hnát J.	129, 131
Hnatko M.	96
Hobzová R.	216
Hoffmann S.	246
Hoksza D.	240
Holas O.	239
Holý P.	208
Honzíček J.	92, 183
Hora L.	126, 299
Horáčková Š.	118, 256, 261
Horčíciak M.	73, 75, 137, 139, 282

Hořejší J.	180
Horáková P.	166
Horová A.	239
Horska K.	122
Horváth B.	213
Hošek J.	205
Hoskvcová I.	91, 287
Hozíček J.	186
Hrabal R.	258
Hrabínová M.	225
Hraníček J.	143, 151
Hrbac J.	77, 84, 284
Hrčková E.	217
Hrdlovič P.	211
Hromadová M.	80, 153, 158, 283
Hrouzková S.	73, 281
Hrubý M.	104, 225
Hrvolová B.	118, 124
Hubáček T.	184
Huber Š.	89, 199, 200, 286
Hudec B.	269
Hudecová D.	222
Hunčák M.	151
Hurychová H.	92
Husárek J.	253
Husáriková L.	162
Hutta M.	82, 284
Hynek V.	265

I

Iakobson G.	100
Ilčíková M.	106, 209
Imramovský A.	169, 218, 234
Imrich J.	103, 148, 212, 216, 219, 246, 290
Indris S.	182
Ivanova B.	249

J

Jaček M.	160, 161
Jágr M.	75
Jakubec P.	77, 84, 284
Jakubíková B.	120, 185, 187
Jamnický M.	180
Jampílek J.	218
Janáčková D.	257
Jáné E.	152
Janek M.	81, 283
Janigová I.	97, 98, 219
Jankovič E.	96
Jankurová Z.	185, 187
Janovcová M.	71, 281

Janovec L.	103, 216, 219, 246, 290
Janová E.	257
Janovská M.	154
Jaroš J.	108
Javorková V.	140
Javorová K.	115
Javůrková B.	260
Jelínek L.	262
Jeremiáš M.	119, 259, 262
Jerigova M.	166
Jerigová M.	150, 170
Jiránek I.	165
Jiroušová J.	131
Jirovsky D.	84, 284
Jíša K.	126, 299
Jochec-Mošková D.	219
John J.	160, 178
Jóna E.	187
Jonšta Z.	96
Jorda R.	226
Jun D.	225
Juránek I.	205
Jurášek M.	220
Jurek K.	89, 199, 286
Jurišová J.	185
Jurka V.	123
Jurok R.	70, 102
Jurová A.	193
Jůza J.	90, 286
Jůzová V.	92
<hr/>	
K	
Kabešová M.	107
Kaftan F.	138
Kalenda P.	90, 287
Kalina J.	118, 119, 124
Kaloušková R.	229
Kalup A.	186
Kameníková P.	119, 262
Kaneko S.	208
Kaniansky D.	136, 139, 163
Karaba A.	125
Karel S.	212
Karlíková M.	69, 88
Karlubíková O.	249
Karpushkin Z.	216
Kasák P.	209, 220, 222, 239, 240
Kasálková N. S.	153
Kassa J.	225
Kavecký Š.	96
Kelbichová V.	205, 221
Kerner L.	221
Khaskheli A. R.	147
Kiessling A.	117
Kilianová M.	77
Klán M.	121
Klečková M.	253
Kleinová A.	109, 135, 226
Kleinová E.	194
Klepalová I.	186
Klepetářová B.	206
Klika Z.	152
Klíma J.	111, 245
Klučáková M.	145
Kmeřová J.	68
Knorová L.	118
Kodým R.	128
Kohutová H.	255
Kolář M.	69, 77, 88, 286
Koleda E.	193
Kolehmainen E.	232
Kolena J.	134
Kolesářová I.	122, 255
Kolivoška V.	80, 148, 153, 283
Kollár J.	217, 240
Kolláriková G.	222
Kolomazník I.	152
Koloušek D.	120, 189
Kolská Z.	153, 196, 197, 201
Komadel P.	96
Koman m.	96
Koman M.	94, 287
Komloova M.	239
Kondeková M.	136
Konečná S.	145
Konyushenko E. N.	105, 291
Kopcová M.	185, 187
Korabecny J.	225, 228
Kósa Cs.	211
<u>Kosina P.</u>	154
Koštejn M.	88, 286
Kostura B.	255
Kotek J.	180
Kotwica K.	223
Kouklíková E.	163
Kousalová J.	236
Kovač D.	126
Kováčová D.	143
Kováčová J.	133
Kováčová J.	154
Kováčová M.	101
Kováčová Z.	155
Kovanda F.	203
Kovář L.	104, 107
Kovářová J.	222, 235

Kovářová M.	169
Kovářová Z.	191
Kowalczuk A.	230
Kozák J.	208, 250
Kozic J.	223
Kožíšek J.	244
Kozlík P.	155
Kožurková M.	219
Krajcar R.	197
Krajčí J.	224
Král V.	107
Králik M.	102
Krátký M.	224
Kratochvíl B.	238
Kraus T.	70, 102
Krejčík L.	238
Krejčová S.	120, 185, 187
Krejčová Y.	72, 281
Krejčová Z.	156
Kremenovic A.	182
Křen V.	173
Kreps F.	122
Kristian P.	212, 216, 219
Křižanová M.	115
Křížek T.	157
Kronek J.	226, 230
Kroneková Z.	240
Krpelík Z.	265
Krtička M.	258
Kruk P.	73, 156, 282
Krupa I.	209, 231
Kryštof V.	226
Kubala M.	154, 173
Kubíček V.	181
Kubička D.	126, 299
Kubičková A.	157
Kubíková B.	85, 188, 285
Kubincová J.	175, 176
Kubinec R.	175, 176, 177
Kuca K.	228, 239
Kuča K.	216, 225
Kuchár J.	183, 188
Kučka J.	104, 108, 225
Kudrlička L.	133
Kulhánek J.	111
Kulszewicz-Bajer I.	105
Kurach E.	223
Kurc L.	265
Kurucová T.	170
Kutschy P.	207, 232
Kváča Z.	193
Kvapilová J.	267
Kvíčala J.	205, 221

Kvítek L.	69, 77, 78, 88, 89, 167, 198, 283, 286
Kvítek O.	189, 197

L

Labuda J.	75, 76
Lachmanová Š.	153, 158
Lacík I.	108, 220, 222, 230, 239, 240
Lahová M.	220
Lalík V.	121
Landová H.	264, 266
Langer V.	182
Lásiková A.	211
Lattová E.	235
Lebeda O.	225
126	
Lehocký M.	109
Lehotay J.	154
Leško J.	255
Lhotka M.	120, 189
Linhart O.	151
Liška A.	110, 245
Lisová I.	256
Lisowska O.	250
Lokaj J.	180
Lorenc D.	152
Lorenz W.	176
Loukou Ch.	153
Luc M.	73, 156, 161, 282
Ludvík J.	91, 110, 111, 245, 287
Ludwig M.	111
Lukeš I.	181, 195
Lukeš V.	223
Luňáková P.	190
Lundh T.	117
Lušpai K.	158
Luštická I.	227
Lustoň J.	226, 230
Luxová J.	190

M

Mačák I.	102
Machovič V.	120, 189
Macková I.	85, 188, 285
Madejová J.	96
Mäder K.	246
Madi N.K.	231
Madl T.	69
Magdolen P.	210
Maixnerová L.	71, 281
Makajová Z.	153
Makowski A.	179, 254

Malachová K.	261	Mičušík M.	240
Málek J.	134	Mičušík M.	104, 106
Maliar T.	256, 258	Mikšík I.	75
Maliarová M.	256	Mikulášek P.	202
Mališ J.	130	Mikulec M.	226, 230
Málková K.	159	Mikulics M.	89, 199, 200, 286
Mallet J. M.	153	Míkuš P.	139, 160, 302
Maloň P.	107	Mikušová K.	142, 235
Malovíková A.	166	Milata V.	80, 113, 141, 243, 283
Maľučká L.	103, 290	Minaříková H.	229
Manová A.	76	Mišková L.	192
Marák J.	136	Mlýnskýv.	124, 298
Maráková K.	139, 160, 302	Mocák J.	151, 154
Marchalín Š.	241, 248	Mocinecová D.	222, 230
Marek A.	227	Mojr V.	70, 102
Marek J.	225, 228	Mojzes P.	84, 284
Mareš K. V.	160	Mojžiš J.	207, 232
Maříková M.	194	Mokrejš P.	257
Markovič M.	228	Molnárová M.	257
Maroszová J.	94, 287	Moncol' J.	94, 96, 229, 287
Marounek M.	241	Moncol' J.	85, 285
Maršálek R.	95	Moravčíková D.	231
Martinec P.	195	Morávek P.	134
Martinková M.	101	Moreau N. J.	67
Mártonová V.	226	Mosnáček J.	98, 106, 237
Maryško M.	89, 199, 286	Mraz J.	165
Máša B.	191	Mrlík M.	106
Masár M.	73, 75, 137, 139, 144, 156, 161, 282	Muchová J.	204
Masaryková N.	82, 284	Mudroňová D.	222
Masek V.	84, 284	Muselík J.	264, 266, 267
Máslová R.	267	Musilek K.	228, 239
Mastihuba V.	255	Musilek K.	225
Mastihubová M.	109, 255		
Mastný L.	191, 192, 229		
Matějčková J.	160, 161	N	
Matejdes M.	81, 283	Nádherný L.	89, 286
Matulová M.	208	Nagy M.	205
Matys J.	166	Navarini L.	208
Matz V.	193	Navrátilová Z.	93, 287
Mazúr M.	162	Němcová L.	71, 162, 281
Mazúr P.	264, 266	Nemec I.	200
Mečiarová M.	244	Němec M.	160, 178
Medvecká J.	94, 287	Němečková D.	67, 113, 236
Medvecký M.	229	Nezval J.	119, 124
Melánová K.	191	Nikiforov A.	129
Mešková M.	100	Nógellová Z.	231
Metelková R.	91, 287	Novák F.	258
Meyer H.	69	Novák I.	109, 132, 135
Michálek J.	216	Nováková Z.	232
Michalíková A.	127	Novotná E.	233
Michalka M.	269	<u>Novotný M.</u>	192
Michalková E.	191	Novotný V.	71, 163, 281
Michałowski T.	93	Nunney T.S.	240

O

Očenáš P.....	232
Olexová A.	149
Olšovský M.	132
Omastová M.....	104, 209
Ondrejovič M.	258
Ondrušová D.	185, 187
Oroszová B.....	101
Ostrovský I.....	175, 176, 177
Otyepka M.....	124, 298

P

Pach L.	180, 185
Padělková Z.....	90, 92, 286
Paidar M.....	129, 130, 131, 264, 266
Pajtášová M.....	185, 187
Palarčík J.	253, 258
Palát K.....	233
Pálková H.....	196
Pálszegi T.....	152
Panáček A.	69, 77, 78, 88, 89, 167, 198, 283, 286
Panov I.	212
Pařík P.....	233
Parschová H.	262
Pastierová A.	163
Pastýřková T.	100
Pataridis S.	75
Patil M.R.	227
Pauk K.....	234
Paulíková H.....	219
Paulíková I.	204
Pavlík V.....	188, 193
Pavlišta M.	202
Pawlaczyk I.	250
Pazdera P.....	67, 112, 113, 236, 242, 247
Pazourek J.	140
Pechar M.	107
Pecková K.	71, 174, 281
Pejchal V.....	234
Peller A.	98
Pentrák M.....	240
Perreault H.	235
Peterová J.....	146
Petrushina I.	129
Pickova J.	117
Piešťanský J.	139, 160, 302
Pikna E.....	155
Pilátová M.....	207, 232
Pistulka P.....	133
Plačková A.	93, 287
Platoš P.....	259

Plevová E.	93, 287
Plocek J.	121, 193
Pločková M.	118, 256, 261
Plšíková J.	219
Plucha V.....	133
Podešva J.....	235
Podolec P.	175, 176, 177
Podolínska S.	101
Pohanka M.	225
Pohořelý M.	119, 259, 262
Pola R.....	107
Polakova K.....	260
Poláková M.	235
Polonský J.	129
Ponomarov O.	236
Popa I.	154
Popelka A.....	109, 135
Popelka Š.	108
Pop-Georgievski O.....	108
Pospíšil L.	80, 153, 283
Pospiskova K.	122, 260
Poučková P.	225
Poživil J.....	127, 265
Prag C.	129
Prášilová J.....	253
Praus P.	78, 79, 140, 166, 259, 283
Preťo J.....	132
Priesolová E.	205
Přikryl J.....	202
Procházka M.	164
Procházková M.	67, 112, 113, 236
Procházková O.	82, 86, 88, 284, 285, 286
Prokeš L.	263
Prokop M.	129
Proks V.	108
Prokůpek L.....	245
Prokůpek L.....	98, 235
Pron A.	105, 223
Prucek R.....	69, 77, 78, 88, 89, 167, 198, 283, 286
Pulišová P.	191, 194
Punčochář M.	119, 262
Putala M.....	100, 213, 215, 221
Pytela O.....	236

R

Rábara L.....	151
Raindl J.	178
Rais J.....	143
Rak D.	194
Rakhmatullin A.....	87, 285
Ramešová Š.....	71, 164, 174, 281
Rapta P.....	158

Raschmanová J. Š.....	101	Schramm G.	69
Ratajová E.	123	Schulzová V.	118
Rauch P.	260	Schwarz M.	121
Reghu R. R.	105	Schwarze M.	238
Reguli J.	114	Ščigel R.	247
Reháková M.	98	Sebela M.	260
Repovský D.	149, 168	Šebesta F.	178
Řezáčová M.	183	Šebesta R.	215, 244
Řezníčková A.	153, 196	Šebesta V.	168
Rievaj M.	76, 170	Sedláček O.	104
Riman D.	84, 284	Sedláček T.	106
Rimarčík J.	223	Sedláčková I.	142
Rimnacova L.	165	Sedláčková P.	261
Rimpelová S.	198	Sedlák D.	220
Rohárik P.	82, 284	Sedlák M.	212, 237
Rokstad A.M.	222	Sedlářová I.	267
Rostášová I.	195	Sedmidubský D.	89, 199, 200, 286
Rozlívková Z.	105, 214, 291	Šefčovičová J.	83, 284
Rubáš V.	126, 299	Seilerová L.	238
Rumlová T.	165	Sekretár S.	122, 255
Ruppenthalová L.	195	Selucký P.	143
Růžička A.	67, 90, 192, 286	Šepelák J.	168
Rybáček J.	208	Šepelák V.	182
Rybáčková M.	205, 221	Šestauberová M.	258
Rybakiewicz R.	105	Ševčík P.	149
Rybáková S.	136	Ševčík R.	67, 242
Rybková Z.	261	Shinoda K.	182
Rychlá L.	97	Siegel J.	197
Rychlovský P.	143, 151	Sieglová I.	107
Rychlý J.	97, 205	Šilha T.	200
Ryšlavá H.	157	Šilhánek J.	116
<hr/>			
S			
Sabolová D.	219	Šimáček P.	126, 134, 299
Sabolová M.	237	Šimánek V.	154
<u>Šafař P.</u>	241, 248	Šimbera J.	67, 242, 247
Safarik I.	122, 260	Šimek P.	165
Šafařík I.	120	Šimko F.	85, 87, 285
Safarikova M.	122	Šimková L.	111, 245
Saito F.	182	Šimon P.	81, 98
Šajbidor J.	117	Šimon V.	258
Sajdl P.	197	Šimonovičová A.	257
Šajgalík P.	96	Šimůnek P.	206
Sališová M.	113	Šindelář V.	243
Samcová E.	123, 159, 160, 161	Šindelář Z.	200
Šaněk F.	89, 199, 200, 286	Šípek M.	265
Sasinková V.	166	Sirajuddin.	147
Sattler M.	69	Šišková A.	99
Schauer J.	131	Šišková K.	204
Schindler M.	205, 221	Škarohlíd J.	169
Schmidt Š.	122, 255	Skoblia S.	119
Scholtzová E.	196	Škultéty L.	108
		Slavětínská R.	229
		Slepička P.	197, 198, 201
		Slepičková Kasálková N.	197, 198

Slezák M.	253	Švec P.	143
Slovák P.	198	Švihlová K.	170
Slovák V.	168, 198, 204	Svoboda J.	191
Smelfková H.	142	Svoboda K.	119, 262
Sobczak A.	179, 254	Svoboda L.	166
Sobolčíak P.	220, 239	Svobodník	167
Sofer Z.	89, 199, 200, 286	Svobodová A.	167
Soják L.	175, 176	Svora P.	194
Sokolová R.	148, 164	Švorc	76
Šoltés L.	205	Švorc L.	170
Šoralová S.	142	Švorčík V.	153, 184, 189, 196, 197, 198, 201
Šoška	171	Svozil D.	240
Sosnovcová I.	118	Šyc M.	119, 262
Soukup O.	239	Sýkora D.	172
Soukupová J.	69, 88	Synytsya A.	241
Špaček V.	235	Sysel P.	135
Špendlíková I.	178	Szabo E.	149
Sperlingova I.	165	Szabóová A.	175, 176, 177
Spěváček J.	103	Szócs V.	152
Špírková M.	109, 135		
Špirochová J.	258	T	
Šponer J.	124, 298	Táborský P.	136
Šrobár F.	82, 284	Tarabová D.	243
Stach M.	239, 240	Tarkowski P.	260
Štancl M.	245	Tasior M.	248
Staňová A.	136	Tesařová E.	167
Staško A.	80, 141, 158, 283	Tisovský Pavol.....	244
Staszek M.	184	Tisovský Peter.....	244
Štefanko M.	102	Titěrová T.	235
Stejskal J.	105, 199, 214, 291	Tkáč J.	83, 284
Štekrová M.	242	Tobrman T.	91, 287
Štěpánková Š.	169, 218, 233, 234	Toffano M.	211
Štich I.	85	Toman P.	128
Stolaříková J.	223	Tomás M.	199
Stolaříková J.	224	Tomášek V.	174
Stolárová M.	199	Tomášová L.	232
Stránská E.	197	Tomčík P.	76, 170
Strejcová D.	268	Tóth G.	268
Studenovský M.	104	Trávníček Z.	154, 186, 194, 200
Stupavska M.	166	Trchová M.	105, 214, 291
Stupavská M.	164, 170	Trenčanová M.	171
Šubrt J.	191, 194	Tripsianes K.	69
Suchá V.	188	Trojan J.	190
Suchomel P.	78, 283	Trojan M.	190
Suggi-Liverani F.	208	Trojková J.	79, 283
Šulcová P.	134, 179, 180, 202	Troška P.	73, 75, 137, 139, 282
Šuleková D.	87, 285	Trostová S.	197, 201
Sulová Z.	170	Tuček J.	77
Sunde S.	128	Tůma J.	241
Suzuki S.	182	Tůma P.	123, 159
Švatarák M.	68	Tunega D.	196
Svatoš A.	138	Turanský R.	85
Švec J.	243		

Turjan J. 208, 250
 Tvrdíková J. 137

U

Uhlár J. 102, 128
 Uhríková A. 101
 Ulbrich K. 104, 107, 217, 246
 Ulrichová J. 154, 173
 Ungvarský J. 219
 Urban J. 245
 Urbanová J. 136
 Uzlová A. 262

V

Vacek J. 84, 154, 173, 284
 Vaculíková L. 93, 287
 Valachová K. 205
 Valášek M. 80, 153, 283
 Valigura D. 94, 287
 Valko M. 148
 Valková S. 116, 202, 295
 Vančo J. 218
 Vaněk O. 107
 Vaněk P. 193
 Vanko V. 132
 Vantová Z. 219
 Vargová M. 103, 290
 Vargová Z. 195
 Vašek V. 257
 Vaverková L. 179
 Vazač K. 131
 Večeřa J. 202
 Večeřa M. 98, 245
 Végh D. 211, 244
 Veizerová L. 139, 160, 302
 Vejchodová M. 116, 295
 Velic D. 166
 Velič D. 113, 149, 152, 164, 168, 170, 171
 Ventura K. 138, 146, 148, 171
 Verilhac J. 105
 Veselý D. 90, 287
 Veselý I. 237
 Veselý M. 203
 Vetchý D. 264, 266
 Větvička D. 104
 Vida N. 100
 Vídenský J. 267
 Vilková M. 103, 290
 Vincze A. 269
 Vinklárek J. 90, 92, 183, 186, 287
 Vinš P. 245

Vinšová J. 106, 218, 223, 224
 Višňovský J. 175, 176, 177
 Vít J. 266
 Vítámvášová E. 93, 287
 Vítková L. 116, 295
 Vizárová K. 98
 Vlček M. 202
 Vojta J. 167
 Vojteková V. 150
 Vojtičková M. 103, 246, 290
 Vojtylová T. 172
 Vollárová O. 150
 Vopička O. 265
 Vo-Thanh G. 211
 Vraníková B. 264
 Vrbíková L. 122, 255
 Vrbková E. 205
 Vrkoslav V. 138
 Vyskočil V. 71, 72, 156, 281
 Vyskočilová - Leitmannová E. 247
 Vyskočilová E. 242
 Vyskočilová-Leitmannová E. 227
 Vysloužil J. 264, 266, 268
 Vystrčilová L. 246

W

Wágner T. 116, 202, 295
 Waisser K. 233
 Walter N. G. 124, 298
 Węclawski M. 248
 Weidlich T. 263
 Wenich Š. 128
 Wimmer Z. 220

Y

Yosypchuk B. 172
 Yosypchuk O. 71, 172, 281

Z

Žabka J. 164
 Zadinová M. 225
 Zagorska M. 105, 223
 Zahradník P. 210
 Zahradnikova L. 117
 Zajoncova L. 260
 Zámstný P. 125
 Zapivovarski Votipka Z. 203
 Zatloukalová M. 173
 Zavadil J. 86, 88, 285, 286

Autorský index

Zavadilová A.	178	Zgažar M.	265
Zavázalová J.	71, 174, 281	Zhang Q.	182
Zboril R.	260	Zich D.	81, 283
Žďánský K.	86, 285	Ziemiańska J.	179, 254
Zdarová-Karasová J.	225	Zima J.	71, 144, 162, 281
Zdeňková R.	247	Zima V.	191
Zdrálková J.	174	Žitka J.	131
Zelenka T.	204	Žitňan M.	152
Zelinka K.	67, 247	Zouharová A.	90
Zgarbová M.	124	Žúžiová J.	241, 248

PROGRAM PREDNÁŠOK

Sekcia 1: Analytická a fyzikálna chémia

Miestnosť: podľa plánu miestností na obálke (žltý farebný kód)

Utorok, 6. september 2011

14:20 - 15:10 PP1 Aleš Růžička

miestnosť Sekcie 1 VYUŽITÍ SLOUČENIN VYŠŠÍCH TETRYLENŮ V KATALÝZE A
žltá MATERIÁLOVÉM INŽENÝRSTVÍ

14:20 - 15:10 PP2 Pavel Pazdera

miestnosť Sekcie 3 PRYSKYŘICE PRO PRŮMYŠLOVOU DEMINERALIZACI VODY JAKO
červená POMOCNÍCI SYNTETICKÉHO CHEMIKA

15:10 - 15:15 *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

15:15 - 15:25 **Úvodná informácia garanta sekcie**

15:25 - 15:50 1P01 Jiří Barek, Aleš Daňhel, Hana Dejmková, Dana Deýlová, Jan Fischer, Vít Novotný, Lenka Němcová, Vlastimil Vyskočil, Oxana Yosypchuk, Jiří Zima
NOVÉ SMĚRY V ELEKTROANALYTICKÉ CHEMII BIOLOGICKY
AKTIVNÍCH LÁTEK

15:50 - 16:15 1P02 Hana Dejmková, Jiří Barek, Jan Dědík, Marcela Janovcová, Lucie Maixnerová, Šárka Ramešová, Jaroslava Zavázalová, Karolina Pecková
NOVÉ MOŽNOSTI AMPÉROMETRICKÉ DETEKCE
AMINODERIVÁTŮ POLYCYKlickÝCH AROMATICKÝCH
UHLOVODÍKŮ V HPLC

16:15 - 16:45 *Prestávka Občerstvenie*

16:45 - 17:10 1P03 Vlastimil Vyskočil, Zuzana Krejčová, Mária Fařarová and Jiří Barek
ELECTROCHEMICAL BIOSENSORS FOR THE DETECTION OF DNA
DAMAGE CAUSED BY ORGANIC ENVIRONMENTAL POLLUTANTS

17:10 - 17:35 1P04 Andrea Hercegová
DÔLEŽITOSŤ ÚPRAVY VZORKY PRE ULTRASTOPOVÚ ANALÝZU
ORGANICKÝCH POLUTANTOV

17:35 - 18:00 1P05 Svetlana Hrouzková
IDENTIFICATION OF PESTICIDE RESIDUES UTILIZING
CHROMATOGRAPHY AND MASS SPECTROMETRY

18:00 - 20:00 *Večera*

20:00 - 24:00 Po Posterové prezentácie: 1Po1-1Po37, 2Po1-2Po26, 3Po1-3Po48, 4Po1-4Po3,
5Po1-5Po10, 6Po1-6Po5

Streda, 7. september 2011

8:30 - 9:20 PP3 Jarmila Kmet'ová

miestnosť Sekcie 1 REFORMA VYUČOVANIA CHÉMIE NA SLOVENSKU A
žltá KONFRONTÁCIA S PRÍRODOVEDNÝM VZDELÁVANÍM V EURÓPE

8:30 - 9:20 PP4 Mária Greifová

miestnosť Sekcie 3 MIKROBIÁLNE KULTÚRY V MLIEKARSTVE, VÝZNAM A FUNKCIE
červená

9:20 - 9:25 *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

9:25 - 9:50 1P06 Marián Masár, Pavol Kruk, Milan Luc, Ladislav Danč, Michal Horčičiak,
Peter Troška

ZÁKLADNÉ ASPEKTY A APLIKÁCIE MINIATURIZOVANÝCH
ANALYTICKÝCH SYSTÉMOV V ELEKTROSEPARAČNÝCH
METÓDACH

9:50 - 10:15 1P07 Daniel Mísicak, Attila Gaal and W. Ronald Fawcett

OXYGEN REDUCTION AT PLATINUM-PALLADIUM
ELECTROCATALYSTS ON A CARBON SURFACE

10:15 - 10:40 1P08 Michal Jágr, Adam Eckhardt, Statis Pataridis, Ivan Mikšík

VYUŽITÍ DVOUROZMĚRNÉ ELEKTROFORÉZY KE STUDIU
PROTEOMU DENTINU LIDSKÝCH ZUBŮ

10:40 - 11:10 *Prestávka Občerstvenie*

11:10 - 11:35 1P09 Ján Labuda

CONCEPT OF DNA-BASED BIOSENSORS

11:35 - 12:00 1P10 Peter Tomčík, Eva Culková, Ľubomír Švorc, Miroslav Rievaj, Dušan Bustin

MOŽNOSTI NEPRIAMEJ VOLTAMPÉROMETRICKEJ DETEKČIE
FLUORIDOVÝCH ANIÓNOV

12:00 - 12:25 1P11 Manová Alena, Beinrohr Ernest, Čacho František, Labuda Ján

ŠPECIÁČNÁ ANALÝZA VYBRANÝCH PRVKOV

12:30 - 14:20 *Obed*

14:20 - 18:00 *Výlety*

18:00 - 20:00 *Večera*

20:00 - 24:00 Po Posterové prezentácie: 1Po38-1Po74, 2Po-27-2Po52, 3Po49-3Po93, 4Po4-
4Po7, 5Po11-5Po20, 5Po6-5Po11

Štvrtok, 8. september 2011

8:30 - 9:20 PP5 Miroslav Švatarák

miestnosť Sekcie 1 PRÍSPEVOK KONVERZNÝCH PROCESOV K ZVÝŠENIU
žltá EFEKTÍVNOSTI RAFINÉRIE

8:30 - 9:20 PP6 Helge Meyer

miestnosť Sekcie 3 STRUCTURAL AND FUNCTIONAL BASIS OF IMMUNE RESPONSE
červená UPON *SCHISTOSOMA MANSONI* INFECTION

9:20 - 9:25 *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

9:25 - 9:50 1P12 Vladimir Halouzka, Petr Jakubec, Jan Hrbac

NANOSTRUCTURED SILVER AND PLATINUM MODIFIED CARBON
FIBER MICROELECTRODES COATED WITH NAFION FOR H₂O₂
DETERMINATION

9:50 - 10:15 1P13 Martina Kilianová, Robert Pucek, Jiří Tuček, Aleš Panáček¹, Libor Kvítek,
Milan Kolář

BINÁRNÍ MAGNETICKÉ NANOKOMPOZITY OXIDŮ ŽELEZA A
NANOČÁSTIC STŘÍBRA A JEJICH ANTIMIKROBIÁLNÍ VLASTNOSTI

10:15 - 10:40 1P14 Petr Suchomel, Libor Kvítek, Aleš Panáček, Robert Pucek

PŘÍPRAVA NANOČÁSTIC STŘÍBRA REDUKCÍ BROMIDU
STŘÍBRNÉHO

10:40 - 11:10 *Prestávka Občerstvenie*

11:10 - 11:35 1P15 Petr Praus, Richard Dvorský, Ondřej Kozák, Kamila Kočí, Stanislav Bartusek

SRÁŽENÍ A STABILIZACE NANOČÁSTIC SULFIDU ZINEČNATÉHO
NA MONTMORILLONITU, MOŽNOSTI VYUŽITÍ PRO FOTOREDUKCI
OXIDU UHLIČITÉHO

11:35 - 12:00 1P16 Richard Dvorský, Jana Trojková, Petr Praus

PŘÍPRAVA NANOAGREGÁTŮ nC₆₀ Z KOLOIDNÍ NANODISPERZE
(C₆₀+toluen)-H₂O

12:00 - 12:25 1P17 Magdaléna Hromadová, Viliam Kolivoška, Miroslav Gál, Lubomír Pospíšil,
Michal Valášek

CONDUCTING PROPERTIES OF EXTENDED VIologen MOLECULES

12:30 - 14:20 *Obed*

14:20 - 15:10 PP7 Radek Cibulka

miestnosť Sekcie 1 ENANTIOSELEKTIVNÍ OXIDACE KATALYZOVANÉ CHIRÁLNÍMI
žltá FLAVINIOVÝMI SOLEMI

14:20 - 15:10 PP8 Libor Kvítek

miestnosť Sekcie 3 NANOČÁSTICE STŘÍBRA – OBJEKT ZÁKLADNÍHO VÝZKUMU I
červená KOMERČNÍCH APLIKACÍ

15:10 - 15:15 *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

15:15 - 15:40 1P18 Vlasta Brezová, Zuzana Barbieriková, Maroš Bella, Viktor Milata, Andrej
Staško

EPR SPIN TRAPPING TECHNIQUE – A POWERFUL TOOL IN THE
INVESTIGATIONS OF PHOTOINDUCED PROCESSES

15:40 - 16:05 1P19 Daniel Zich, Ivan Černušák, Marián Matejdes, Ignác Bugár, Marian Janek

ŠTÚDIUM INFRAČERVENÝCH SPEKTIER JEDNODUCHÝCH
ZLÚČENÍN POMOCOU EXPERIMENTÁLNYCH MERANÍ A
TEORETICKÝCH VÝPOČTOV

16:05 - 16:30 1P20 Peter Šimon

PROCESSES IN CONDENSED PHASE AND NON-ARRHENIAN
KINETICS

- 16:30 - 17:00 *Prestávka Občerstvenie*
- 17:00 - 17:25 1P21 Fedor Šrobár, Olga Procházková
DIELEKTRICKÉ VLASTNOSTI VODÍKOVÝCH SENZORŮ NA BÁZI
STRUKTUR TYPU MOS
- 17:25 - 17:50 1P22 Góra R.¹, Hutta M., Rohárik P., Masaryková N.
MOŽNOSTI VYUŽITIA 2D KVAPALINOVEJ CHROMATOGRAFIE NA
CHARAKTERIZÁCIU HUMÍNOVÝCH LÁTOK
- 17:50 - 18:15 1P23 Jana Šefčovičová, Jaroslav Filip, Peter Gemeiner, Ján Tkáč
STANOVENIE D-SORBITOLU BIOSENZOROM PRIPRAVENÝM
POMOCOUBIONANOKOMPOZITU
- 19:00 - 24:00 *Slávnostný večierok*

Piatok, 9. september 2011

- 8:30 - 8:55 1P24 Petr Jakubec, Jan Hrbac, David Jirovsky, Daniel Riman, Vladimír Halouzka, ,
Zdenka Bartosova, Vlastimil Masek, Peter Mojzes, Jan Vacek
ELECTROCHEMICAL PRETREATMENT OF CARBON FIBER
MICROELECTRODE BASED ON SINUSOIDAL-WAVE POTENTIAL
CYCLING AND ITS APPLICATION TO AMPEROMETRIC SENSING
- 8:55 - 9:20 1P25 Radoslav Halko
ANALÝZA VZORIEK ŽIVOTNÉHO PROSTREDIA AFINITNOU
CHROMATOGRAFIOU NA IMOBILIZOVANÝCH IÓNOCH KOVU
- 9:20 - 9:45 1P26 Robert Turanský, Ján Brndiar, Ivan Štich
MODELOVANIE A INTERPRETÁCIA NANOTRIBOLÓGIE POMOCOUB
DFT
- 9:45 - 10:15 *Prestávka Občerstvenie*
- 11:05 - 11:10 *Presun z miestností jednotlivých sekcií*
- 11:10 - 12:00 *Panelová diskusia ako záver zjazdu*
- 12:00 - 14:00 *Obed*

Sekcia 2: Anorganická a materiálová chémia

Miestnosť: podľa plánu miestností na obálke (modrý farebný kód)

Utorok, 6. september 2011**14:20 - 15:10 PP1 Aleš Růžička**miestnosť Sekcie 1
žltá VYUŽITÍ SLOUČENIN VYŠŠÍCH TETRYLENŮ V KATALÝZE A
MATERIÁLOVÉM INŽENÝRSTVÍ**14:20 - 15:10 PP2 Pavel Pazdera**miestnosť Sekcie 3
červená PRYSKYŘICE PRO PRŮMYSLOVOU DEMINERALIZACI VODY JAKO
POMOCNÍCI SYNTETICKÉHO CHEMIKA15:10 - 15:15 *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*15:15 - 15:25 **Úvodná informácia garanta sekcie**15:25 - 15:50 2P01 Miroslav Boča, Blanka Kubíková, František Šimko, Iveta Macková,
Ján Moncol- PHASES OF K_2TAF_7 AND K_3TAF_8 15:50 - 16:15 2P02 Peter Barborík, Miroslav BočaODOLNOSTĚ ZIRKÓNIOVÝCH ZLIATIN V ROZTAVENÝCH
FLUORIDOVÝCH SOLIACH16:15 - 16:45 *Prestávka Občerstvenie*16:45 - 17:10 2P03 Jiří Zavadil, Olga Procházková, Jan Grym, Karel ŽďánskýHIGH PURITY InP LAYERS OF BOTH CONDUCTIVITY TYPES
PREPARED BY EXPLOITING Pr ADDITION INTO THE LPE GROWTH
MELT17:10 - 17:35 2P04 František Šimko, Aydar Rakhmatullin, Catherine Bessada- ŠTÚDIUM ŠTRUKTÚRY FLUORIDOVÝCH SÚSTAV POMOCOU NMR
SPEKTROSKOPIE17:35 - 18:00 2P05 Vladimír Danielik, Pavel Fellner, Dáša Šuleková- ZLÚČENINY CHRÓMU V NÍZKOTAVITELNÝCH ELEKTROLYTOCH
NA VÝROBU HLINÍKA18:00 - 20:00 *Večera*20:00 - 24:00 Po Posterové prezentácie: 1Po1-1Po37, 2Po1-2Po26, 3Po1-3Po48, 4Po1-4Po3,
5Po1-5Po10, 6Po1-6Po5

Streda, 7. september 2011

8:30 - 9:20 PP3 Jarmila Kmet'ová

miestnosť Sekcie 1 REFORMA VYUČOVANIA CHÉMIE NA SLOVENSKU A
žltá KONFRONTÁCIA S PRÍRODOVEDNÝM VZDELÁVANÍM V EURÓPE

8:30 - 9:20 PP4 Mária Greifová

miestnosť Sekcie 3 MIKROBIÁLNE KULTÚRY V MLIEKARSTVE, VÝZNAM A FUNKCIE
červená

9:20 - 9:25 *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

9:25 - 9:50 2P06 Olga Procházková, Jiří Zavadil, Jan Grym, Martin Koštejn
THE INFLUENCE OF LOCALIZED SURFACE PLASMONS ON THE
PHOTOLUMINESCENCE PROPERTIES OF METAL-COATED InP

9:50 - 10:15 2P07 Aleš Panáček, Libor Kvítek, Robert Pucek, Milan Kolář
ANTIMIKROBIÁLNÍ AKTIVITA A TOXICITA NANOČÁSTIC STRĚBRA

10:15 - 10:40 2P08 Robert Pucek, Ariana Fargašová, Aleš Panáček, Libor Kvítek
REKRYSTALIZACE NANOČÁSTIC STRĚBRA A JEJICH POUŽITÍ
V POVRCHEM ZESÍLENÉ rAMANOVĚ SPEKTROSKOPII

10:40 - 11:10 *Prestávka Občerstvenie*

11:10 - 11:35 2P09 Zdeněk Sofer, David Sedmidubský, Filip Šaněk, Štěpán Huber, Ladislav
Nádherný, Miroslav Maryško, Jiří Hejtmánek, Karel Jurek, Martin Mikulics
TENKÉ VRSTVY OXIDU ZINEČNATÉHO PŘIPRAVENÉ METODOU
MOVPE

11:35 - 12:00 2P10 Josef Jůza, Ivan Fortelný, Bojan Dimzoski
KOALESCENCE V TAVENINÁCH POLYMERNÍCH SMĚSÍ

12:00 - 12:25 2P11 Zdeňka Padělková, Aleš Růžička a Aneta Zouharová
C, N-CHELATOVANÝ STANNYLEN A JEHO REAKTIVITA SE
SILOXANY

12:30 - 14:20 *Obed*

14:20 - 18:00 *Výlety*

18:00 - 20:00 *Večera*

20:00 - 24:00 Posterové prezentácie: 1Po38-1Po74, 2Po-27-2Po52, 3Po49-3Po93, 4Po4-
4Po7, 5Po11-5Po20, 5Po6-5Po11

Štvrtok, 8. september 2011

8:30 - 9:20 PP5 Miroslav Švatarák

miestnosť Sekcie 1 PRÍSPEVOK KONVERZNÝCH PROCESOV K ZVÝŠENIU
žltá EFEKTÍVNOSTI RAFINÉRIE

8:30 - 9:20 PP6 Helge Meyer

miestnosť Sekcie 3 STRUCTURAL AND FUNCTIONAL BASIS OF IMMUNE RESPONSE
červená UPON *SCHISTOSOMA MANSONI* INFECTION

9:20 - 9:25 *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

9:25 - 9:50 2P12 Milan Erben, Jaromír Vinklár, Petr Kalenda, David Veselý
ACYL FERROCENY JAKO SIKATIVA PRO ALKYDOVÉ NÁTĚRY

9:50 - 10:15 2P13 Radka Metelková, Tomáš Tobrman, Jiří Ludvík, Irena Hoskocová
ELEKTROCHEMICKÉ CHOVÁNÍ AMINOKARBENOVÝCH
KOMPLEXŮ Cr(0) A Fe(0) S HETEROCYKlickým SUBSTITUENTEM

10:15 - 10:40 2P14 Jaromír Vinklár, Hana Hurychová, Veronika Jůzová, Zdenka Padělková, Jan
Honzíček, Aleš Eisner

SYNTÉZA, CHARAKTERIZACE A CYTOTOXICKÁ AKTIVITA
VANADOCENOVÝCH KOMPLEXŮ S N,N CHELÁTUJÍCÍMI LIGANDY

10:40 - 11:10 *Prestávka Občerstvenie*

11:10 - 11:35 2P15 Tomasz Michałowski, Wojciech Grochala

UNUSUAL MIXED-VALENCE AND MIXED-CATION
ANTIFERROMAGNETIC FLUOROSULFATES OF SILVER(II)

11:35 - 12:00 2P16 Eva Vítámvášová, Adriana Plačková, Eva Plevová, Zuzana Navrátilová,
Lenka Vaculíková

MONTMORILLONIT A JEHO ORGANODERIVÁTY JAKO
ADSORBENTY KOVŮ

12:00 - 12:25 2P17 Marian Koman, Ján Moncol', Dušan Valigura and Jaroslava Maroszová
THE COORDINATION COMPOUNDS Cu(II) WITH
PYRIDYLMETHANOLS

12:30 - 14:20 *Obed*

14:20 - 15:10 PP7 Radek Cibulka

miestnosť Sekcie 1 ENANTIOSELEKTIVNÍ OXIDACE KATALYZOVANÉ CHIRÁLNÍMI
žltá FLAVINIOVÝMI SOLEMI

14:20 - 15:10 PP8 Libor Kvítek

miestnosť Sekcie 3 NANOČÁSTICE STŘÍBRA – OBJEKT ZÁKLADNÍHO VÝZKUMU I
červená KOMERČNÍCH APLIKACÍ

15:10 - 15:15 *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

15:15 - 15:40 2P18 Jana Medvecká, Ján Moncol', Dušan Valigura
ZMENA REAKČNÝCH PODMIENOK, CESTA K VZNIKU RÔZNYCH
SUBSTITUOVANÝCH BENZOÁTOMEĎNATÝCH KOMPLEXOV S N,N-
DIETYLNIKOTÍNAMIDOM

15:40 - 16:05 2P19 Adriana Czímerová, Juraj Bujdák
RESONANCE ENERGY TRANSFER IN THIN FILMS PREPARED USING
LAYER-BY-LAYER ASSEMBLY

16:05 - 16:30 2P20 Roman Maršálek
ADSORPCE Pb^{II}, Cu^{II} A Cr^{III} NA ŽELEZITÝCH SRAŽENINÁCH

16:30 - 17:00 *Prestávka Občerstvenie*

17:00 - 17:25 2P21 M. Hnatko, Evelyn A. Bolaños C, Š. Kavecký, Z. Jonšta, P. Šajgalík
PŘÍPRAVA A VLASTNOSTI KOMPOZITNEJ SiC – CNT KERAMIKY

- 17:25 - 17:50 2P22 Jana Madejová, Ľuboš Jankovič, Peter Komadel
CHARACTERIZATION OF ORGANO-MONTMORILLONITES BY
NEAR-INFRARED SPECTROSCOPY
- 17:50 - 18:15 2P23 Jozef Halaška, Marian Koman, Ján Moncol'
SUPRAMOLECULAR HYDROGEN-BONDING NETWORKS AND
ISOMERISM OF MONOMERIC COPPER(II) HALOGENBENZOATES
WITH NICOTINAMIDE
- 19:00 - 24:00 *Slávnostný večierok*

Piatok, 9. september 2011

- 11:10 - 12:00 Panelová diskusia ako záver zjazdu
- 12:00 - 14:00 *Obed*

Sekcia 3: Organická chémia a polyméry

Miestnosť: podľa plánu miestností na obálke (červený farebný kód)

Utorok, 6. september 2011**14:20 - 15:10 PP1 Aleš Růžička**miestnosť Sekcie 1
žltá VYUŽITÍ SLOUČENIN VYŠŠÍCH TETRYLENŮ V KATALÝZE A
MATERIÁLOVÉM INŽENÝRSTVÍ**14:20 - 15:10 PP2 Pavel Pazdera**miestnosť Sekcie 3
červená PRYSKYŘICE PRO PRŮMYSLOVOU DEMINERALIZACI VODY JAKO
POMOCNÍCI SYNTETICKÉHO CHEMIKA*15:10 - 15:15 Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií***15:15 - 15:25 Úvodná informácia garanta sekcie**15:25 - 15:50 3P01 Lyda Rychlá, Jozef Rychlý, Ivica Janigová, Katarína Csomorová
- PLASTY AKO ZRANITELNÁ ČASŤ NIEKTORÝCH UMELECKÝCH
ARTEFAKTOV15:50 - 16:15 3P02 Luboš Prokůpek, Miroslav Večeřa, Radka Adámková
TEPELNĚ ODOLNÉ PRYSKYŘICE KYANÁTOVÉHO TYPU JAKO
NOSIČE PRO IDENTIFIKAČNÍ TĚLÍSKA*16:15 - 16:45 Prestávka Občerstvenie*16:45 - 17:10 3P03 András Peller, Milena Reháková, Katarína Vizárová, Peter Šimon
EFFECT OF PRINTING INKS ON THE THERMOOXIDATIVE
STABILITY OF WHATMAN PAPER USING SIMULTANEOUS DTA/TG
METHODS17:10 - 17:35 3P04 Katarína Borská, Martin Danko, Ivica Janigová, Jaroslav Mosnáček
- FOTOCHEMICKY URÝCHLENÁ DEGRADÁCIA POLY(E-
KAPROLAKTÓNU)17:35 - 18:00 3P05 Alena Šišková, Dušan Berek
- NOVEL APPROACH TO THE SEPARATION AND MOLECULAR
CHARACTERIZATION OF POLYMER SYSTEMS – SEQUENCED
TWO-DIMENSIONAL LIQUID CHROMATOGRAPHY*18:00 - 20:00 Večera*20:00 - 24:00 Po Posterové prezentácie: 1Po1-1Po37, 2Po1-2Po26, 3Po1-3Po48, 4Po1-4Po3,
5Po1-5Po10, 6Po1-6Po5

Streda, 7. september 2011

8:30 - 9:20 PP3 Jarmila Kmet'ová

miestnosť Sekcie 1 REFORMA VYUČOVANIA CHÉMIE NA SLOVENSKU A
žltá KONFRONTÁCIA S PRÍRODOVEDNÝM VZDELÁVANÍM V EURÓPE

8:30 - 9:20 PP4 Mária Greifová

miestnosť Sekcie 3 MIKROBIÁLNE KULTÚRY V MLIEKARSTVE, VÝZNAM A FUNKCIE
červená

9:20 - 9:25 *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

9:25 - 9:50 3P06 Michaela Mešková, Martin Putala

SYNTHESIS, PROPERTIES AND APPLICATION OF HIGHLY
STERICALLY HINDERED BINAPHTHALENE-BASED
MONOPHOSPHANE LIGANDS

9:50 - 10:15 3P07 Petr Beier, George Iakobson, Norbetr Vida, Tereza Pastýříková

NEW ROUTE TOWARDS (PENTAFLUOROSULFANYL)BENZENES

10:15 - 10:40 3P08 Alena Uhríková, Beáta Oroszová, Margaréta Kováčová, Simona Podolínska,

Jana Špaková Raschmanová, Miroslava Martinková, Jozef Gonda
STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA MYCESTERICÍNOV D-G

10:40 - 11:10 *Prestávka Občerstvenie*

11:10 - 11:35 3P09 Ján Uhlár, Ivan Mačák, Milan Králik, Michal Štefanko

PRÍPRAVA KONCENTROVANÉHO DICYKLOHEXYLAMÍNU PRI
VÝROBE CYKLOHEXYLAMÍNU Z ANILÍNU V KVAPALNEJ FÁZE
NA RUTÉNIOVOM KATALYZÁTORE

11:35 - 12:00 3P10 Ján Imrich, Slávka Hamul'aková, Ladislav Dražna, Lucia Maľučká, Mária

Vilková, Marianna Vargová, Ladislav Janovec, Mária Vojtičková
NOVEL ACRIDINES WITH ANTITUMOR AND
ANTICHOLINESTERASE ACTIVITY

12:30 - 14:20 *Obed*

14:20 - 18:00 *Výlety*

18:00 - 20:00 *Večera*

20:00 - 24:00 Posterové prezentácie: 1Po38-1Po74, 2Po-27-2Po52, 3Po49-3Po93, 4Po4-
4Po7, 5Po11-5Po20, 5Po6-5Po11

Štvrtok, 8. september 2011**8:30 - 9:20 PP5 Miroslav Švatarák**

miestnosť Sekcie 1 PRÍSPEVOK KONVERZNÝCH PROCESOV K ZVÝŠENIU
žltá EFEKTÍVNOSTI RAFINÉRIE

8:30 - 9:20 PP6 Helge Meyer

miestnosť Sekcie 3 STRUCTURAL AND FUNCTIONAL BASIS OF IMMUNE RESPONSE
červená UPON *SCHISTOSOMA MANSONI* INFECTION

9:20 - 9:25 *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

9:25 - 9:50 3P11 Jiří Spěváček

STUDIUM FÁZOVÉHO PŘECHODU KLUBKO-GLOBULE VE
VODNÝCH ROZTOCÍCH TERMORESPONZIVNÍCH POLYMERŮ NMR
METODAMI

9:50 - 10:15 3P12 Mária Omastová, Matej Mičušík

RÖNTGENOVÁ FOTOELEKTRONOVÁ SPEKTROSKOPIA A
MOŽNOSTI JEJ VYUŽITIA

10:15 - 10:40 3P13 Martin Hrubý, Ondřej Sedláček, Martin Studenovský, Jan Kučka, David Větvička, Lubomír Kovář, Karel Ulbrich

VÍCESTUPŇOVÉ SMĚROVÁNÍ AUGEROVA ZÁŘIČE ¹²⁵I DO DNA
NÁDOROVÝCH BUNĚK POMOCÍ POLYMERNÍHO NOSIČOVÉHO
SYSTÉMU

10:40 - 11:10 *Prestávka Občerstvenie*

11:10 - 11:35 3P14 Renata Rybakiewicz, Renji R. Reghu, David Djurado, Hubert Cybulski, Juozas V. Grazulevicius, Irena Kulszewicz-Bajer, Damien Boudinet, Jean-Marie Verilhac, Malgorzata Zagorska, Adam Pron

ORGANIC FIELD EFFECT TRANSISTORS FROM TRIARYLAMINE
SUBSTITUTED ARYLENE BISIMIDES

11:35 - 12:00 3P15 Zuzana Rozlívková, Elena N. Konyushenko, Miroslava Trchová, Jaroslav Stejskal

PROMĚNY MOLEKULÁRNÍ STRUKTURY POLYANILINEM
POKRYTÝCH UHLÍKOVÝCH NANOTRUBEK V PRŮBĚHU
KARBONIZACE

12:00 - 12:25 3P16 Markéta Ilčíková, Miroslav Mrlík, Dušan Chorvát, Matej Mičušík, Tomáš Sedláček, Katarína Csomorová, Jaroslav Mosnáček

PHOTOACTUATING NANOCOMPOSITES BASED ON BLOCK
COPOLYMERS AND COVALENTLY MODIFIED MULTIWALLED
CARBON NANOTUBES

12:30 - 14:20 *Obed*

14:20 - 15:10 PP7 Radek Cibulka

miestnosť Sekcie 1 ENANTIOSELEKTIVNÍ OXIDACE KATALYZOVANÉ CHIRÁLNÍMI
žltá FLAVINIOVÝMI SOLEMI

14:20 - 15:10 PP8 Libor Kvítek

miestnosť Sekcie 3 NANOČÁSTICE STŘÍBRA – OBJEKT ZÁKLADNÍHO VÝZKUMU I
červená KOMERČNÍCH APLIKACÍ

15:10 - 15:15 *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

15:15 - 15:40 3P17 Jarmila Vinšová

ANTITUBERKULOTIKA 21. STOLETÍ

15:40 - 16:05 3P18 Michal Pechar, Robert Pola, Karel Ulbrich, Lucie Bednářová, Petr Maloň, Vlastimil Král, Irena Siegllová, Milan Fábry, Ondřej Vaněk, Martina Kabešová, Luboš Kovář

- COILED COIL MOTIV JAKO UNIVERZÁLNÍ SPOJKA PRO VAZBU
REKOMBINANTNÍCH PROTEINŮ NA POLYMERNÍ LÉČIVA
- 16:05 - 16:30 3P19 Andrea Ďuračková, Slávka Bekešová, Ludovít Škultéty, Igor Lacík
HYDROGÉLY MODIFIKOVANÉ PEPTIDMI PRE ZLEPŠENIE
IMUNOLOGICKEJ OCHRANY ENKAPSULOVANÝCH BUNIEK
- 16:30 - 17:00 *Prestávka Občerstvenie*
- 17:00 - 17:25 3P20 Vladimír Proks, Josef Jaroš, Ognen Pop-Georgievski, Jan Kučka, Štěpán
Popelka, Aleš Hampl, František Rypáček
„CLICK & SEED“ STRATEGIE BIOMIMETICKÉ MODIFIKACE
MATERIÁLŮ
- 17:25 - 17:50 3P21 Anton Popelka, Igor Novák, Marián Lehocký, Angela Kleinová, Milena
Špírková, Ivan Chodák
POLYETYLÉN UPRAVENÝ VYBRANÝMI ANTIBAKTERIÁLNÝMI
LÁTKAMI S VYUŽITÍM NÍZKOTEPLOTNEJ PLAZMY
- 17:50 - 18:15 3P22 Mária Mastihubová
ENZYMATIC ACYLATIONS OF GLUCOSIDES BY PHENOLIC ACIDS
AND THEIR ANALOGUES
- 19:00 - 24:00 *Slávnostný večierok*

Piatok, 9. september 2011

- 8:30 - 8:55 3P23 Alan Liška, Jiří Ludvík, Albert J. Fry
ELEKTROCHEMICKÁ REDUKCE MOLEKUL S VÍCE REDOXNÍMI
CENTRY: MONO-, DI-, TRI- A TETRANITROKALIX[4]ARENY A
JEJICH MODELOVÉ NITROBENZENY
- 8:55 - 9:20 3P24 Ludmila Šimková, Jiří Ludvík, Jiří Klíma
SPEKTRO-ELEKTROCHEMICKÁ STUDIE FOX-7 V APROTICKÉM
PROSTŘEDÍ
- 9:20 - 9:45 3P25 Filip Bureš, Hana Čermáková, Jiří Kulhánek, Miroslav Ludwig
VZTAH STRUKTURA-VLASTNOSTI A NELINEÁRNĚ OPTICKÉ
EFEKTY V DONOR 5,6 DISUBSTITUOVANÝCH PYRAZIN-2,3-
DIKARBONITRILECH
- 9:45 - 10:15 *Prestávka Občerstvenie*
- 10:15 - 10:40 3P26 Barbora Andělová, Procházková Markéta, Pazdera Pavel
NOVÝ SOFISTIKOVANÝ ZPŮSOB SYNTÉZY 1-PYRID-4-YL-
PIPERAZINU A JEHO DERIVÁTU JAKO STAVEBNÍCH BLOKŮ PRO
IMOBILIZOVANÉ KATALYTICKÉ SYSTÉMY
- 10:40 - 11:05 3P27 Dana Němečková, Barbora Andělová, Markéta Procházková a Pavel Pazdera
SYNTÉZY 1,1-DISUBSTITUOVANÝCH PIPERAZIN-1-IOVÝCH SOLÍ
- 11:05 - 11:10 *Presun z miestností jednotlivých sekcií*
- 11:10 - 12:00 *Panelová diskusia ako záver zjazdu*
- 12:00 - 14:00 *Obed*

Sekcia 4: Vyučovanie a história chémie

Miestnosť: podľa plánu miestností na obálke (fialový farebný kód)

Utorok, 6. september 2011**14:20 - 15:10 PP1 Aleš Růžička**

miestnosť Sekcie 1 žltá	VYUŽITÍ SLOUČENIN VYŠŠÍCH TETRYLENŮ V KATALÝZE A MATERIÁLOVÉM INŽENÝRSTVÍ
----------------------------	------------------------------------------------------------------------------

14:20 - 15:10 PP2 Pavel Pazdera

miestnosť Sekcie 3 červená	PRYSKYŘICE PRO PRŮMYSLOVOU DEMINERALIZACI VODY JAKO POMOCNÍCI SYNTETICKÉHO CHEMIKA
-------------------------------	---------------------------------------------------------------------------------------

15:10 - 15:15 *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

15:15 - 15:25 Úvodná informácia garanta sekcie

15:25 - 15:50	4P01	Ivan Herčko, <u>Dušan Velič</u> , Marta Sališová and Viktor Milata
-		225 ANNIVERSARY OF THE 1 ST INTERNATIONAL SCIENTIFIC CONGRESS – SLOVAKIA, SKLENÉ TEPLICE

15:50 - 16:15	4P02	<u>Ján Reguli</u>
		ČO BY MALI VEDCI VEDIEŤ O KOMUNIKÁCI S VEREJNOSŤOU?

16:15 - 16:45 *Prestávka Občerstvenie*

16:45 - 17:10	4P03	<u>Emil Adamkovič</u>
		35 ROKOV TVORBY UČEBNÍČ CHÉMIE PRE ZŠ U NÁS

17:10 - 17:35	4P04	<u>Martin Bílek</u>
-		MOŽNOSTI A RIZIKA VYUŽÍVÁNÍ POČÍTAČOVÝCH ANIMACÍ A SIMULACÍ V POČÁTEČNÍ VÝUCE CHEMIE

18:00 - 20:00 *Večera*

20:00 - 24:00	Po	Posterové prezentácie: 1Po1-1Po37, 2Po1-2Po26, 3Po1-3Po48, 4Po1-4Po3, 5Po1-5Po10, 6Po1-6Po5
---------------	----	------------------------------------------------------------------------------------------------

Streda, 7. september 2011

8:30 - 9:20 PP3 Jarmila Kmet'ová

miestnosť Sekcie 1 REFORMA VYUČOVANIA CHÉMIE NA SLOVENSKU A
žltá KONFRONTÁCIA S PRÍRODOVEDNÝM VZDELÁVANÍM V EURÓPE

8:30 - 9:20 PP4 Mária Greifová

miestnosť Sekcie 3 MIKROBIÁLNE KULTÚRY V MLIEKARSTVE, VÝZNAM A FUNKCIE
červená

9:20 - 9:25 *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

9:50 - 10:15 4P05 Mgr. Katarína Javorová, Milica Križanová, Beáta Brestenská
VYUČOVANIE CHÉMIE V DIGITÁLNEJ ŠKOLE

10:15 - 10:40 4P06 PaedDr. Ivan Hnát
CHÉMIA V KVÁDRI (POČÍTAČA)

10:40 - 11:10 *Prestávka Občerstvenie*

11:10 - 11:35 4P07 Jaroslav Šilhánek
MÁ SMYSL UČIT PŘEDMĚT CHEMICKÁ INFORMATIKA?

12:30 - 14:20 *Obed*

14:20 - 18:00 *Výlety*

18:00 - 20:00 *Večera*

20:00 - 24:00 Posterové prezentácie: 1Po38-1Po74, 2Po-27-2Po52, 3Po49-3Po93, 4Po4-4Po7, 5Po11-5Po20, 5Po6-5Po11

Štvrtok, 8. september 2011

8:30 - 9:20 PP5 Miroslav Švatarák

miestnosť Sekcie 1 PRÍSPEVOK KONVERZNÝCH PROCESOV K ZVÝŠENIU
žltá EFEKTÍVNOSTI RAFINÉRIE

8:30 - 9:20 PP6 Helge Meyer

miestnosť Sekcie 3 STRUCTURAL AND FUNCTIONAL BASIS OF IMMUNE RESPONSE
červená UPON *SCHISTOSOMA MANSONI* INFECTION

9:20 - 9:25 *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

9:50 - 10:15 4P08 S.Valková, T. Wágner, L. Vítková, M. Vejchodová, M. Frumar
PODPORA ODBORNÉHO VZDĚLÁVÁNÍ A ROZVOJE
VĚDECKOVÝZKUMNÉHO TÝMU CENTRA MATERIÁLOVÉHO
VÝZKUMU NA UNIVERZITĚ PARDUBICE

10:40 - 11:10 *Prestávka Občerstvenie*

12:30 - 14:20 *Obed*

14:20 - 15:10 PP7 Radek Cibulka

miestnosť Sekcie 1 ENANTIOSELEKTIVNÍ OXIDACE KATALYZOVANÉ CHIRÁLNÍMI
žltá FLAVINIOVÝMI SOLEMI

14:20 - 15:10 PP8 Libor Kvítek

miestnosť Sekcie 3 NANOČÁSTICE STRĚBRA – OBJEKT ZÁKLADNÍHO VÝZKUMU I
červená KOMERČNÍCH APLIKACÍ

19:00 - 24:00 *Slávnostný večierok*

Piatok, 9. september 2011

11:10 - 12:00 Panelová diskusia ako záver zjazdu

12:00 - 14:00 *Obed*

Sekcia 5: Potravinárstvo, životné prostredie a biotechnológia

Miestnosť: podľa plánu miestností na obálke (oranžový farebný kód)

Utorok, 6. september 2011**14:20 - 15:10 PP1 Aleš Růžička**miestnosť Sekcie 1
žltá VYUŽITÍ SLOUČENIN VYŠŠÍCH TETRYLENŮ V KATALÝZE A
MATERIÁLOVÉM INŽENÝRSTVÍ**14:20 - 15:10 PP2 Pavel Pazdera**miestnosť Sekcie 3
červená PRYSKYŘICE PRO PRŮMYSLOVOU DEMINERALIZACI VODY JAKO
POMOCNÍCI SYNTETICKÉHO CHEMIKA*15:10 - 15:15 Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií***15:15 - 15:25 Úvodná informácia garanta sekcie****15:25 - 15:50 5P01 Ján Šajbidor**

- LIPIDS IN HUMAN NUTRITION

**15:50 - 16:15 5P02 Lucia Zahradnikova, Torbjörn Lundh, Anders Kiessling, Lars Edebo, Jana
Pickova***RHIZOPUS ORYZAE – A NOVEL SOURCE OF FISH FEED AND THEIR
LIPID PROFILE**16:15 - 16:45 Prestávka Občerstvenie***16:45 - 17:10 5P03 Barbora Hrvolová, Jiří Kalina**

TERMOSTABILITA CIS IZOMERŮ LUTEINU

**17:10 - 17:35 5P04 Lenka Knorová, Šárka Horáčková, Eva Dvořáková, Ivana Sosnovcová, Věra
Schulzová, Milada Plocková**

FERMENTACE SÓJI BAKTERIEMI MLÉČNÉHO KVAŠENÍ

17:35 - 18:00 5P05 Jakub Nezval, Jiří Kalina- VÝVOJ HPLC-DAD METODY STANOVENÍ VYBRANÝCH
FENOLICKÝCH LÁTEK A JEJÍ APLIKACE PŘI STUDIU VLIVU
RŮZNÝCH RADIAČNÍCH PODMÍNEK NA JEJICH AKUMULACI V
LISTECH JEČMENE JARNÍHO*18:00 - 20:00 Večera***20:00 - 24:00 Po** Posterové prezentácie: 1Po1-1Po37, 2Po1-2Po26, 3Po1-3Po48, 4Po1-4Po3,
5Po1-5Po10, 6Po1-6Po5

Streda, 7. september 2011

8:30 - 9:20 PP3 Jarmila Kmet'ová

miestnosť Sekcie 1 REFORMA VYUČOVANIA CHÉMIE NA SLOVENSKU A
žltá KONFRONTÁCIA S PRÍRODOVEDNÝM VZDELÁVANÍM V EURÓPE

8:30 - 9:20 PP4 Mária Greifová

miestnosť Sekcie 3 MIKROBIÁLNE KULTÚRY V MLIEKARSTVE, VÝZNAM A FUNKCIE
červená

9:20 - 9:25 *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

9:25 - 9:50 5P06 Michael Pohorelý, Michal Jeremiáš, Petra Kameníková, Karel Svoboda,
Siarhei Skoblia, Michal Šyc, Miroslav Punčochář

TERMICKÉ VYUŽITÍ BIOMASY PROCESEM PARCIÁLNI OXIDACE

9:50 - 10:15 5P07 Barbora Doušová, Bohumila Jakubíková, Ivo Šafařík, Stanislava Krejčová,
David Koloušek, Miloslav Lhotka, Vladimír Machovič

VYUŽITÍ ODPADNÍCH BIOMATERIÁLŮ K SORPCI TOXICKÝCH
OXOANIONTŮ ARSENU, SELENU A ANTIMONU
Z KONTAMINOVANÝCH VOD

10:15 - 10:40 5P08 David Havlíček, Miroslav Klán, Jiří Plocek

AKTINOLIT – AZBESTOVÝ MINERÁL V ŽIVOTNÍM PROSTŘEDÍ NA
PLZEŇSKU A JEHO DETEKCE PRÁŠKOVOU RENTGENOVOU
DIFRAKČÍ

10:40 - 11:10 *Prestávka Občerstvenie*

11:10 - 11:35 5P09 Marián Schwarz, Vladimír Lalík

SLEDOVANIE ZÁVISLOSTI BIOCHEMICKÝCH UKAZOVATEĽOV OD
KONCENTRÁCIE OZÓNU

11:35 - 12:00 5P10 Ivo Safarik, Katerina Horska, Kristyna Pospiskova, Mirka Safarikova

MAGNETICALLY RESPONSIVE BIOCOMPOSITES FOR
ENVIRONMENTAL TECHNOLOGY AND BIOTECHNOLOGY

12:00 - 12:25 5P11 Štefan Schmidt, Lenka Vrbíková, František Kreps, Jarmila Hlásniková, Ivana
Kolesárová, Stanislav Sekretár, Július Annus

METHODS FOR EDIBLE FATS AND OILS SHELF LIFE
DETERMINATION AND PREDICTION

12:30 - 14:20 *Obed*

14:20 - 18:00 *Výlety*

18:00 - 20:00 *Večera*

20:00 - 24:00 Posterové prezentácie: 1Po38-1Po74, 2Po-27-2Po52, 3Po49-3Po93, 4Po4-
4Po7, 5Po11-5Po20, 5Po6-5Po11

Štvrtok, 8. september 2011

8:30 - 9:20 PP5 Miroslav Švatarák

miestnosť Sekcie 1 PRÍSPEVOK KONVERZNÝCH PROCESOV K ZVÝŠENIU
žltá EFEKTÍVNOTI RAFINÉRIE

8:30 - 9:20 PP6 Helge Meyer

miestnosť Sekcie 3 STRUCTURAL AND FUNCTIONAL BASIS OF IMMUNE RESPONSE
červená UPON *SCHISTOSOMA MANSONI* INFECTION

9:20 - 9:25 *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

9:25 - 9:50 5P12 Petr Tůma, Eva Samcová

ELEKTROFORETICKÉ MONITOROVÁNÍ AMINOKYSELIN PRO
KLINICKÉ ÚČELY

9:50 - 10:15 5P13 Martina Bancířová, Eva Ratajová

FALSE-POSITIVE AND FALSE-NEGATIVE BLOODSTAIN DETECTION

10:15 - 10:40 5P14 Jiří Kalina, Jakub Nezval, Barbora Hrvolová, Michala Zgarbová

ANALYTICKÁ CHEMIE V FYZIOLOGII ROSTLIN

10:40 - 11:10 *Prestávka Občerstvenie*

11:10 - 11:35 5P15 Vojtěch Mlýnský, Pavel Banáš, Nils G. Walter, Jiří Šponer and Michal
Otyepka

QM/MM STUDIES OF HAIRPIN RIBOZYME SELF-CLEAVAGE
SUGGEST THE FEASIBILITY OF MULTIPLE COMPETING REACTION
MECHANISMS INVOLVING IONIZED FORMS OF NUCLEOTIDES G8
AND A38

12:30 - 14:20 *Obed*

14:20 - 15:10 PP7 Radek Cibulka

miestnosť Sekcie 1 ENANTIOSELEKTIVNÍ OXIDACE KATALYZOVANÉ CHIRÁLNÍMI
žltá FLAVINIOVÝMI SOLEMI

14:20 - 15:10 PP8 Libor Kvítek

miestnosť Sekcie 3 NANOČÁSTICE STRĚBRA – OBJEKT ZÁKLADNÍHO VÝZKUMU I
červená KOMERČNÍCH APLIKACÍ

15:10 - 15:15 *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

15:15 - 16:30 **Súťaž Cena Shimadzu 2011**

16:30 - 17:00 *Prestávka Občerstvenie*

17:00 - 18:15 **Súťaž Cena Shimadzu 2011**

19:00 - 24:00 *Slávnostný večierok*

Piatok, 9. september 2011

11:10 - 12:00 Panelová diskusia ako záver zjazdu

12:00 - 14:00 *Obed*

Sekcia 6: CHEMPROGRESS

Miestnosť: podľa plánu miestností na obálke (zelený farebný kód)

Utorok, 6. september 2011

14:20 - 15:10 PP1 Aleš Růžička

miestnosť Sekcie 1 VYUŽITÍ SLOUČENIN VYŠŠÍCH TETRYLENŮ V KATALÝZE A
žltá MATERIÁLOVÉM INŽENÝRSTVÍ

14:20 - 15:10 PP2 Pavel Pazdera

miestnosť Sekcie 3 PRYSKYŘICE PRO PRŮMYSLOVOU DEMINERALIZACI VODY JAKO
červená POMOCNÍCI SYNTETICKÉHO CHEMIKA

15:10 - 15:15 *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

15:15 - 15:25 **Úvodná informácia garanta sekcie**

15:25 - 15:50 P01 Martin Bajus, Elena Hájeková

- LABORATÓRNA, POLOPREVÁDZKOVÁ A PREVÁDZKOVÁ
PYROLÝZA OJAZDENÝCH PNEUMATÍK NA CHEMIKÁLIE A
PALIVÁ NA SLOVENSKU

15:50 - 16:15 P02 Petr Zámostný, Adam Karaba, Zdeněk Bělohav

ANALÝZA PYROLÝZY VYSOKOVROUCÍCH SUROVIN
MATEMATICKÝM MODELEM S AUTOMATICKÝM GENEROVÁNÍM
SÍTĚ REAKCÍ

16:15 - 16:45 *Prestávka Občerstvenie*

16:45 - 17:10 P03 doc. Ing. Jaromír Lederer, CSc., Ing. Václav Veselý CSc., Ing. Dušan
Kovača,

SPOLOČNE SPLYNOVÁNÍ ROPNÝCH ZBYTKŮ A BIOMASY

17:10 - 17:35 P04 Vlastimil Rubáš, David Kubička, Lukáš Hora, Kamil Jíša, Pavel Šimáček

- FISCHER-TROPSCHOVA SYNTÉZA - PŘÍPRAVA A HODNOCENÍ
PRODUKTŮ

17:35 - 18:00 P05 Jaroslav Poživiš, Vladimír Hanta

- METHODOLOGY FOR IMPROVING ENERGY EFFICIENCY OF A
CHEMICAL PLANT

18:00 - 20:00 *Večera*

20:00 - 24:00 Po Posterové prezentácie: 1Po1-1Po37, 2Po1-2Po26, 3Po1-3Po48, 4Po1-4Po3,
5Po1-5Po10, 6Po1-6Po5

Streda, 7. september 2011

8:30 - 9:20 PP3 Jarmila Kmeťová

miestnosť Sekcie 1 REFORMA VYUČOVANIA CHÉMIE NA SLOVENSKU A
žltá KONFRONTÁCIA S PRÍRODOVEDNÝM VZDELÁVANÍM V EURÓPE

8:30 - 9:20 PP4 Mária Greifová

miestnosť Sekcie 3 MIKROBIÁLNE KULTÚRY V MLIEKARSTVE, VÝZNAM A FUNKCIE
červená

12:30 - 14:20 *Obed*

14:20 - 18:00 *Výlety*

18:00 - 20:00 *Večera*

20:00 - 24:00 Posterové prezentácie: 1Po38-1Po74, 2Po-27-2Po52, 3Po49-3Po93, 4Po4-
4Po7, 5Po11-5Po20, 5Po6-5Po11

Štvrtok, 8. september 2011

8:30 - 9:20 PP5 Miroslav Švatarák

miestnosť Sekcie 1 PRÍSPEVOK KONVERZNÝCH PROCESOV K ZVÝŠENIU
žltá EFEKTÍVNOTI RAFINÉRIE

8:30 - 9:20 PP6 Helge Meyer

miestnosť Sekcie 3 STRUCTURAL AND FUNCTIONAL BASIS OF IMMUNE RESPONSE
červená UPON *SCHISTOSOMA MANSONI* INFECTION

9:20 - 9:25 *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

9:25 - 9:50 6P06 Anna Michalíková, Jozef Fiala

NETRADIČNÉ VYUŽITIE SOLÁRNEJ ENERGIE

9:50 - 10:15 6P07 Monika Drakselová, Roman Kodým, Svein Sunde, Karel Bouzek

DVOJROZMĚRNÝ DYNAMICKÝ MATEMATICKÝ MODEL
DEGRADACE KATALYTICKÉ VRSTVY V PALIVOVÉM ČLÁNKU
TYPU PEM

10:15 - 10:40 6P08 Peter Toman, Štefan Wenchich, Ján Uhlár

PRÍPRAVA DICYKLOHEXYLAMÍNU HYDROGENÁCIU
DIFENYLAMÍNU

10:40 - 11:10 *Prestávka Občerstvenie*

11:10 - 11:35 6P09 Jakub Polonský, Carsten Prag, Aleksey Nikiforov, Irina Petrushina, Erik Christensen

VÝVOJ KERAMICKÝCH NOSIČŮ KATALYZÁTORŮ PRO ANODICKÝ
VÝVOJ KYSLÍKU V ELEKTROLYZÉRU PRO ROZKLAD VODY S
POLYMERNÍM ELEKTROLYTEM

11:35 - 12:00 6P10 Matin Prokop, Jaromír Hnát, Martin Paidar

CHARAKTERIZACE ANION SELEKTIVNÍCH HETEROGENNÍCH
MEMBRÁN

12:00 - 12:25 6P11 Eleonóra Benčíková, Marián Berešík

BEZPEČNÁ VYSOKOFREKVENČNÁ VENTILÁCIA, ELIMINÁCIA
RIZÍK NOZOKOMIÁLNYCH NÁKAZ A BOKOMPATIBILITA
POVRCHOVEJ ÚPRAVY INOVAČNÝCH MATERIÁLOV

12:30 - 14:20 *Obed*

14:20 - 15:10 PP7 Radek Cibulka

miestnosť Sekcie 1 ENANTIOSELEKTIVNÍ OXIDACE KATALYZOVANÉ CHIRÁLNÍMI
žltá FLAVINIOVÝMI SOLEMI

14:20 - 15:10 PP8 Libor Kvítek

miestnosť Sekcie 3 NANOČÁSTICE STRĚBRA – OBJEKT ZÁKLADNÍHO VÝZKUMU I
červená KOMERČNÍCH APLIKACÍ

15:10 - 15:15 *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

15:15 - 15:40 6P12 Jakub Mališ, Martin Paidar, Karel Bouzek

VLASTNOSTI NAFIONU ZA ZVÝŠENÉHO TLAKU A TEPLoty

15:40 - 16:05 6P13 Karel Vazač, Martin Paidar, Karel Bouzek

ALKALICKÁ ELEKTROLÝZA VODY S MEMBRÁNou NAFION

16:05 - 16:30 6P14 Karel Bouzek, Jaromír Hnát, Martin Paidar, Jana Jiroušová, Jan Schauer, Jan Žitka

VLIV ANION-SELEKTIVNÍHO POLYMERNÍHO POJIVA NA
VLASTNOSTI ANODY OBSAHUJÍCÍ NEPLATIONOVÉ
KATALYZÁTORY PŘI ALKALICKÉ ELEKTROLÝZE VODY

16:30 - 17:00 *Prestávka Občerstvenie*

- 17:00 - 17:25 6P15 Igor Novák, Vladimír Vanko, Jozef Prešo, Zuzana Hloušková, Ivan Chodák
POVRCHOVÉ A ADHÉZNE VLASTNOSTI SUBSTRÁTOV V SPOJI
DREVOTRIESKOVÁ DOSKA - PVC FÓLIA LEPENOM
POLYURETÁNOVÝM ADHEZÍVOM
- 17:25 - 17:50 6P16 Milan Olšovský, Radovan Drábik, Branislav Cíbik
MOŽNOSTI NÁHRADY KARCINOGENNÝCH OLEJOV V
GUMÁRENSKOM PRIEMYSLE
- 17:50 - 18:15 6P17 Ladislav Kudrlička, Jana Kovačová, Petr Pistulka, Vladimír Plucha
SEPARACE TĚŽKÝCH KOVŮ Z ODPADNÍCH VOD V KOVOHUTÍCH
PŘÍBRAM REDUKČNĚ SORPČNÍM POSTUPEM
- 19:00 - 24:00 *Slávnostný večierok*

Piatok, 9. september 2011

- 8:30 - 8:55 6P18 Bohumil Kratochvíl
SPOLUPRÁCE AKADEMICKÉ SFÉRY S PRŮMYSEM HRST POCITŮ,
ÚVAH A ZKUŠENOSTÍ
- 8:55 - 9:20 6P19 Petra Šulcová a Jiří Málek
SOUČASNOST A PERSPEKTIVY ODBORNÉ SKUPINY TERMICKÉ
ANALÝZY
- 9:20 - 9:45 6P20 Ing. Jiří Kolena, CSc., Ing. Pavel Morávek, Ing. Pavel Šimáček, PhD.
GLYCEROL JAKO SUROVINA PRO VÝROBU KOMPONENT PRO
MOTOROVÁ PALIVA
- 9:45 - 10:15 *Prestávka Občerstvenie*
- 10:15 - 10:40 6P21 Igor Novák, Petr Sysel, Ivan Chodák, Anton Popelka, Milena Špírková,
Angela Kleinová, Štěpán Florián
SURFACE PROPERTIES OF POLY(IMIDE-CO-SILOXANE) - BASED
ADHESIVES
- 11:05 - 11:10 *Presun z miestností jednotlivých sekcií*
- 11:10 - 12:00 *Panelová diskusia ako záver zjazdu*
- 12:00 - 14:00 *Obed*

Cena Shimadzu 2011

Miestnosť: podľa plánu miestností na obálke (oranžový farebný kód)

Štvrtok, 8. september 2011**14:20 - 15:10 PP7 Radek Cibulka**miestnosť Sekcie 1 ENANTIOSELEKTIVNÍ OXIDACE KATALYZOVANÉ CHIRÁLNÍMI
žltá FLAVINIOVÝMI SOLEMI**14:20 - 15:10 PP8 Libor Kvítek**miestnosť Sekcie 3 NANOČÁSTICE STRĚBRA – OBJEKT ZÁKLADNÍHO VÝZKUMU I
červená KOMERČNÍCH APLIKACÍ15:10 - 15:15 *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*15:15 - 15:30 Monika Kondeková, Andrea Staňová, Jozef Marák, Dušan Kaniansky
ANALYTICAL POTENTIAL OF PREPARATIVE ISOTACHOPHORESIS
IN COLUMN - COUPLING CONFIGURATION WITH MASS
SPECTROMETRY IN ANALYSIS OF PROTEINS15:30 - 15:45 Stanislava Rybáková, Jana Urbanová, Petr Tábořský
STUDIUM INTERAKCE SANGUILUTINU S DNA POMOCÍ
FLUORESCENČNÍ SPEKTROSKOPIE15:45 - 16:00 Michal Horčíciak, Marián Masár, Peter Troška
VYUŽITIE ELEKTROFORETICKÝCH ČIPOV V ANALÝZE
ENVIROMENTÁLNYCH A BIOLOGICKÝCH VZORIEK16:00 - 16:15 Aleš Daňhel, Jana Tvrđíková, Jiří Berek
DEVELOPMENT AND APPLICATION OF CRYSTALLIC SILVER
AMALGAM WORKING ELECTRODES IN VOLTAMMETRY AND
AMPEROMETRY16:15 - 16:30 Ondřej Fryš, Aleš Eisner, Petra Bajerová a Karel Ventura
VYUŽITÍ MODERNÍCH EXTRAČNÍCH METOD PŘI ANALÝZE
BEZDÝMNÝCH PRACHŮ16:30 - 17:00 *Prestávka Občerstvenie*17:00 - 17:15 Filip Kaftan, Vladimír Vrkoslav, Josef Cvačka a Aleš Svatoš
ZOBRAZOVACÍ HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIE KUTIKULÁRNÍCH
LIPIDŮ OCTOMILKY OBECNÉ17:15 - 17:30 Juraj Piešťanský, Peter Mikuš, Katarína Maráková, Lucia Veizerová
SPOJENIE SEPARAČNÝCH TECHNÍK IZOTACHOFORÉZY A
KAPILÁRNEJ ZÓNOVEJ ELEKTROFORÉZY S LASEROM
INDUKOVANOU FLUORESCENČNOU DETEKCIU PRE
VYSOKOCITLIVÉ STANOVENIE CHINÍNU V KLINICKÝCH
MATRICIACH17:30 - 17:45 Peter Troška, Marián Masár, Michal Horčíciak, Richard Chudoba, Dušan
Kaniansky
MONITORING NIEKTORÝCH NEUROLOGICKÝCH OCHORENÍ
KAPILÁRNOU ELEKTROFORÉZOU NA ČIPE17:45 - 18:00 Věra Javorková, Jiří Pazourek
STUDIUM FLAVONOIDNÍCH GLYKOSIDŮ PO HYDROLÝZE
METODOU HPLC-DAD-ELSD ZAMĚŘENÉ NA IDENTIFIKACI
CUKERNÉ SLOŽKY18:00 18:15 Ondřej Kozák, Petr Praus, Kamila Kočí
CdS NANOPARTICLES ON MONTMORILLONITE AND THEIR
PHOTOCATALYTIC PROPERTIES19:00 - 24:00 *Slávnostný večierok*

